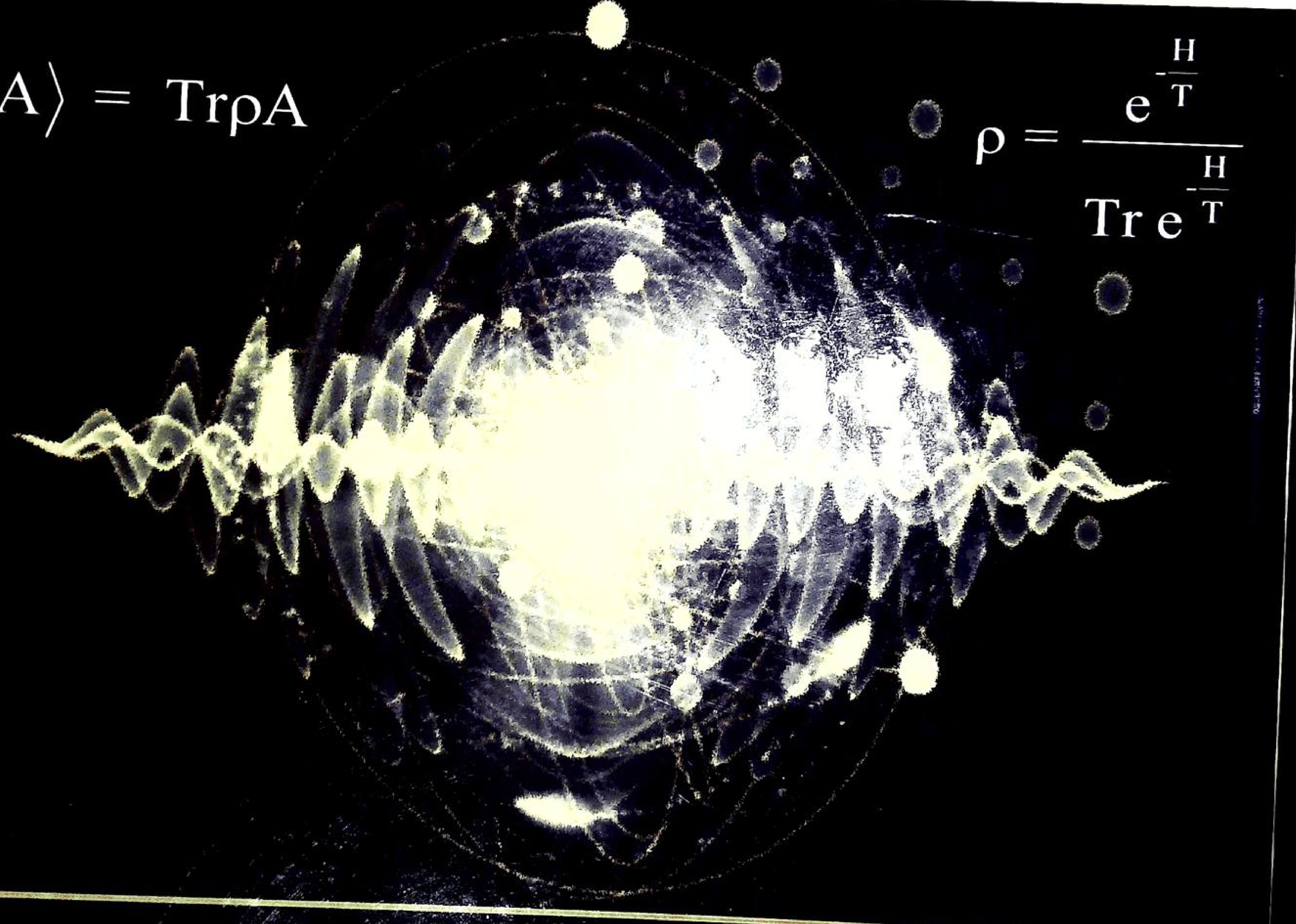
محمد البغدادي

أسس الفيزياء المعاصرة

$$\langle A \rangle = \mathrm{Tr}\rho A$$

$$\rho = \frac{e^{-\frac{H}{T}}}{\mathrm{Tr}\, e^{-\frac{H}{T}}}$$



المجلد الخامس

الفيزياء الإحصائية

محمد البغـدادي

أسس الفيزياء المعاصرة

المجلد الخامس

الفيزياء الإحصائيـة

أسس الفيزياء المعاصرة

المجلد الخامس: الفيزياء الإحصائية

المؤلف: محمد البغدادي
الطبعة: الأولى 2015
الناشر: طوب بريس للطباعة والنشر والتوزيع
رقم الإيداع القانوني: 2016MO0160
ردمك: 978-9954-594-50-6
الطبع: طوب بريس - الرباط

هذه لغتي، ومعجزتي عصا سحري
حدائق بابلي ومسلتي، وهويتي الأولى
معدني الصقيل

محمود درويش

"لم يبد علماؤنا رغبة قوية لحماية اللغة الألمانية، بعضهم لأنهم يظنون فعلاً أنه لا يمكن لباس الحكمة إلا بلباس لاتيني أو يوناني، والبعض الآخر لأنهم يخشون أن يكتشف العالم جهلهم الذي يخبئونه الآن خلف قناع من الكلمات الكبيرة... لقد تركت الأمة بعيدة عن المعرفة".

لايبنيز (1646–1716)

مؤسس حساب التفاضل

مقدمة الكتاب

يعترض تعليم العلوم باللغة العربية مشاكل عديدة، لعل أهمها افتقار اللغة العربية إلى مراجع يستطيع الطالب استشارتها عندما يجد صعوبة ما في فهم ما بين يديه من أمال أو كتب تغطي أحد المقررات أو عندما يريد تجاوز هذه الأمالي والكتب والحصول على بعض الأجوبة للأسئلة العديدة التي يطرحها على نفسه والتي لا يمكن إلا للمرجع أن يضعها بين يديه أو عندما يرغب في التوسع في المعرفة. والمشكلة الهامة الثانية هي عدم وجود مقابل واحد متفق عليه للمصطلح العلمي الأجنبي بين مختلف البلدان العربية أو بين الجامعيين في قطر واحد أو المنتمين إلى أقسام علمية متقاربة كالفيزياء والرياضيات بل وبين العاملين في القسم الواحد.

ونحن نود في هذا الكتاب إعطاء صورة واضحة عميقة وشاملة للأسس التي تقوم عليها الفيزياء وتغطية المواضيع التي نعتقد أن على الفيزيائي استيعابها في المراحل الجامعية الأولى – لنقل سنوات الدراسة الأربعة أو الخمسة الأولى– سواء توقف عن الدراسة بعدها أو تابعها. فقد حاولنا للوصول إلى هذه الغاية أخذ أمرين بعين الاعتبار، أولهما ضرورة الانطلاق من المفاهيم والمبادئ كما يعيها الفيزيائيون المعاصرون ومن الأهداف التي يضعها مختلف الباحثين نصب أعينهم، لما يوفر ذلك من وضوح في الرؤية واختصار للوقت ومن فعالية لا يمكن للعرض التاريخي أن يوفرها بأي حال من الأحوال. وثانيهما ملاءمة هذه الضرورة مع المقتضيات التربوية في التسلسل من الأسهل إلى الأصعب وبالتالي مراعاة تسلسل البرامج المتبع في أغلب الجامعات إلى أبعد حد ممكن.

وهكذا فإن الفرضية الذرية مثلاً هي من أهم المفاهيم الأساسية في فيزياء اليوم : إن بنية المادة هي بنية غير متصلة ولا نتصور هذه المادة إلا على شكل حبيبات سواء كانت هذه الحبيبات ذرات أو جزيئات أو نويات؛ أو جسيمات تتكون منها هذه الأنواع الثلاثة نسميها جسيمات أولية. ولهذا فقد انطلقنا من هذا المفهوم لشرح مختلف الظواهر الفيزيائية بما فيها الظواهر الجهرية. ثم إن مفهوم المادة، كيانها، مرتبط بمفهوم المكان والزمان. ولهذا فقد تعرضنا بالتفصيل وبالترتيب إلى مفهوم الفضاء –المكان– الخاوي بمعزل عن مفهوم المادة وعن مفهوم الزمان وبنينا الميكانيك النيوتوني التقليدي وانتقلنا بعد ذلك إلى مفهوم للمكان متحد مع مفهوم الزمان وبنينا نظرية النسبية الخاصة التي ارتبط اسمها باسم آنشتاين وأخيراً إلى هذه المفاهيم مرتبطة ببعضها كلها معاً لإعطاء فكرة عن نظرية النسبية العامة التي وضعها آنشتاين.

وقد بيّنا في دراسة مختلف فروع الفيزياء أهمية المبادئ التي يبتكرها الفكر الفيزيائي الخلاق لفهم وتفسير الظواهر الطبيعية والتنبؤ بحدوث ظواهر فيزيائية جديدة وتوحيد ظواهر، متباينة للوهلة الأولى، كالكهربائية والمغنطيسية والضوء مثلاً في نظرية واحدة تعبر عنها أربع معادلات رياضية هي مبادئ الكهرطيسية التي وضعها ماكسويل في القرن التاسع عشر. وأوضحنا أن قبول المبادئ وبقاءها لا ينجم عن بساطتها أو جمال عبارتها الرياضية مهما كان لهاتين الصفتين من أثر وإنما لتطابق النتائج المترتبة عليها مع الواقع التجريبي.

والفيزياء علم تجريبي قبل كل شيء والتجربة وحدها هي التي تقرر الحقيقة أي أن معرفة الواقع تبدأ بالتجربة وتنتهي بها. وهكذا ولما كانت المبادئ هي نتاج الفكر والخيال الإنساني، تستوحي التجربة أحياناً ولكنها لا تستخلص منها، فهي لا تتصف بالأزلية ولا تصلح في كل الأحوال. إن المغامرة الفيزيائية تسعى إلى الوصول إلى المبادئ الأكثر شمولية المفسرة لأكبر عدد ممكن من الحادثات والموحدة لمختلف فروع الفيزياء.

وقد آلينا جهداً إعطاء صورة متسعة، متكاملة منطقياً، للنظريات التي عالجناها وتجنبنا وسعنا العروض الوصفية المقيمة التي تعيق التعليم العالي والتي لا تليق به في نظرنا وحاولنا الإحاطة بدقة بمختلف جوانب المواضيع المطروقة. وقد سمح لنا تجنب التكرار الناتج عن الانتقال من العرض الوصفي إلى العرض الرياضي استنفاد الموضوع وتكريس حيز أكبر للغة الوحيدة التي يمكن أن تصف الطبيعة وتصفها ونعني بذلك الرياضيات.

إننا على وعي تام بما يترتب على عرض الفيزياء على هذا الشكل : مبادئ مصاغة بقالب رياضي يزداد تعقيداً ويبتعد عن الحدس مع تطور الفيزياء وتعمقها في بنية المادة وبنية المكان والزمان، وقوانين –نظريات ودعاوى وقضايا رياضية – تنتج عنها منطقياً مما يحول الفيزياء إلى رياضيات من حيث كونها تقوم على دراسة بنى معينة – معرفة بإعطاء علاقات تركيب بين عناصر مجموعة ما – فهي فيزياء البنى بقدر كون الرياضيات المعاصرة رياضيات البنى. ولكن لم لا؟ ألا تهدف الفيزياء فيما تهدف إليه إلى الوحدة مع الهندسة وما هي الهندسة؟ يقول آنشتاين "تبقى الهندسة علماً رياضياً مادام استنتاج النظريات من المصادرة (الموضوعة) مسألة منطقية صرفة ولكنها في الوقت نفسه علم فيزيائي بقدر ما تحوى مصادراتها على مقولات تخص الأشياء الطبيعية ولا يمكن التحقق منها إلا بالتجربة. وهكذا فإن المحاذير المترتبة على العرض الموضوعاتي (المصادراتي) Axiomatic للفيزياء تزول إذا منحت الأشغال المخبرية والتطبيقية أهمية خاصة، إضافة إلى دورها المألوف في تعلم العلوم الطبيعية والتعامل معها. فالتجربة وحدها هي التي ترفع عن الفيزياء الموضوعاتية كل طابع مسلماتي ودوغماتي. كما أن الإشارة إلى تطور الأفكار في الفيزياء من آن إلى آخر وإعطاء الخطوط العريضة للطريق المتعرج والمتقلب الذي اتبعته تسهم – بغض النظر عن أهميتها التاريخية – في إلقاء الأضواء على المحتوى الحديث للمبادئ وفي تجنب الأخطار الناجمة عن الطريقة التي اتبعناها.

لقد قسمنا هذا الكتاب إلى مجلدات خمسة :

I– الميكانيك التقليدي النيوتوني والنسبوي

II– الميكانيك الإحصائي والترموديناميك

III– الكهرطيسية والضوء

IV– ميكانيك الكم

V– الفيزياء الإحصائية

ويتضمن محتوى هذه المجلدات المواد كما درسناها خلال سنوات عديدة تتجاوز العقدين في جامعتي الرباط ودمشق وغيرهما في المرحلتين الجامعيتين الأوليين وقسماً طفيفاً مما درسناه في المرحلة بعد

الجامعية. ونحن وإن لم نعتمد مصدراً معيناً فإننا لا ندعي الإبداع أو التجديد اللهم إلا فيما يتعلق بالأخذ بيد القارئ المبتدئ والوصول به إلى عمق المفاهيم والقوانين الفيزيائية المعروفة في مختلف الفروع من وجهة نظر تؤمن بوحدة الفيزياء وبوحدة طريقة دراستها.

ولقد طمحنا إلى إصدار هذا الكتاب إن أمكن بلغتين : العربية والفرنسية أو العربية والإنكليزية حتى يعتاد القارئ العربي ذو الثقافة المزدوجة التعامل العلمي مع لغته العربية ولغة التدريس الأجنبية في بلده في آن واحد. وأخيراً فإن المراجع التي عدنا إليها غالباً هي :

1– سلسلة الفيزياء النظرية للانداو وليفشيتز بأجزائها التسعة المترجمة عن الروسية إلى الفرنسية والإنكليزية والألمانية.

2– دروس الفيزياء النظرية لسومرفلد بأجزائها الستة وهي مترجمة عن الألمانية إلى الإنكليزية ويتجاوز محتوى هاتين السلسلتين محتوى كتابنا بكثير.

3– محاضرات فاينمان في الفيزياء بثلاثة أجزاء وهي مترجمة عن الإنكليزية إلى الفرنسية والعربية.

4– دروس الفيزياء لجامعة بيركلي بخمسة أجزاء وهي أيضاً مترجمة إلى الفرنسية.

يغطي المرجعان الأخيران برامج السنتين الأولى والثانية في جامعات الولايات المتحدة ولكنهما يبقيان، وخاصة الأول منهما – محاضرات فاينمان – أفضل ما يمكن أن ينصح الفيزيائي مدرساً وطالباً بقراءته.

لقد قسمنا كل مجلد إلى فصول يتألف كل منها من فقرات مرقمة بعدد بدءاً من الواحد ومن أرقام – تحت فقرات – مرقمة بعددين أولهما يدل على الفقرة وثانيهما إلى تحت الفقرة أما العلاقات فيشار إليها، في الفصل، برقمين أولهما (من اليسار) رقم الفقرة وثانيهما رقم العلاقة في الفقرة المذكورة وبثلاثة أرقام عندما لا تقع العلاقة في الفصل المذكور وهكذا فإن (4.2.5) تعني العلاقة رقم 5 في الفقرة الثانية من الفصل الرابع. ونشير إلى العلاقة بأربعة أرقام أولها روماني I، II، III، IV، V، عندما لا تقع العلاقة في المجلد المذكور.

****

أود أولا وقبل كل شيء أن أوجه شكري وامتناني للسيد عبد الإله بن كيران فلولا مبادرته لما تم نشر هذا الكتاب بالمغرب.

كما أود أن أعبر عن شكري للسيدة بشرى حسني – وكانت قد عملت معي في مختبر الفيزياء النظرية – للمجهود الذي بذلته لفك رموز كتابتي في هذا الكتاب وفي مؤلفات أخرى، ولعلو باعها في التنقل بين اللغة العربية واللغات الأوربية التي كتبت بها؛ لا أعرف غيرها قادرا على القيام بهذا العمل بنفس الهدوء والصبر الذي تتمتع بهما.

وأود أخيرا التعبير عن خالص الشكر لمؤسسة طوب بريس لقبولها نشر هذا الكتاب ولعنايتها بإخراجه على الشكل الذي هو عليه.

مقدمة

نقصد بالفيزياء الإحصائية فيزياء مجموعات كبيرة من الجسيمات الخاضعة إلى الميكانيك الكمومي. لقد بينا في المجلدات السابقة أن الاختلاف الجوهري بين الميكانيك التقليدي وميكانيك الكم هو قبول هذا الأخير، في صيغته الحالية، بالبنية الاحتمالية للمادة. وهي بنية منشؤها رفضه لإمكانية تحديد الشروط البدائية بدقة (مبدأ اللاتحديد) ولمفهوم المسار الذي تقتضيه هذه الشروط. إن كل ما يمكننا فعله في حساب طاقات الإلكترون في الحقل الكهربائي للنواة، على سبيل المثال، هو تعيين احتمالات وجود الإلكترون في مستوى الطاقة هذا أو ذاك؛ ثم القيام بالقياس على أعداد كبيرة من الحالات المتماثلة لإثبات صحة التنبؤ.

أقمنا أسس الترموديناميك في المجلد الثاني على الميكانيك التقليدي المطبق على أعداد كبيرة من الجسيمات. إلا أن كبر هذه الأعداد – عدد آفوغادرو – الذي يجعل من المستحيل تتبع حركاتها الفردية دفعنا إلى إدخال مفاهيم وخواص تخضع لها المجموعات الكبيرة، مفاهيم إحصائية لا وجود لها في الميكانيك كالأنتروبية ودرجة الحرارة؛ كما جعلنا نكرس الفصل الأول من الترموديناميك إلى هذه المفاهيم: إلى الميكانيك الإحصائي.

لكن الجسيمات الصغيرة، الجزيئات والذرات والجسيمات الأولية المكونة لها لا تخضع لقوانين الميكانيك التقليدي وللميكانيك الإحصائي. ولذا فقد فشل الترموديناميك في مسألتين هامتين هما حرارة الأجسام الصلبة النوعية وإشعاع الجسم الأسود. أشرنا في حينه إلى أن الفشل الثاني هو الذي دفع بلانك إلى وضع فرضية كمّ الطاقة وأسس الميكانيك الكمومي. لقد انبثق هذا الميكانيك من صلب الترموديناميك ولكننا أهملنا هذا المنشأ الذي يعنى بالأعداد الكبيرة ولم ننظر في المجلد السابق إلا إلى الحالات المماثلة للميكانيك التقليدي: جسيم أو جسيمات محدودة في حقل خارجي.

لقد آن الآوان للنظر في المسائل الإحصائية القائمة على الميكانيك الكمومي على غرار النظر إلى احتمالات منشؤها الأعداد الكبيرة تضاف إلى الاحتمالات المتعلقة بالجسيمات المنفردة – وهذا ما سنفعله منذ الفصل الأول.

ستبقى المفاهيم والتعريفات الجماعية، الأنتروبية، درجة الحرارة، الحرارة النوعية، الخ... دون تغيير وستدخل الفيزياء الإحصائية سهماً للزمن يفصل بين الماضي والمستقبل يناقض قوانين الميكانيك الكمومي الذي لا يفرق بينهما، مثله مثل كل قوانين الفيزياء التي درسناها – الميكانيك التقليدي والنسبوي، الكهرطيسية والأخرى التي لم ندرسها، نظريات الحقول المكممة.

أما الدالات الإحصائية التقليدية فسنقابلها بمؤثرات تفعل في الفضاءات الهيلبرتية كما يقتضيه مبدأ المقابلة. يقابل كثافة الاحتمال، $\rho(p, q, t)$، دالة التوزع الإحصائي – المعرفة في فضاء الطور ذي الـ

$2n$ بعداً (p, q) حيث $p = p_1, p_2, \dots p_n$ ، $q = q_1, q_2, \dots q_n$ نقطة فيه و n عدد درجات الحرية - مؤثر الكثافة (مصفوفة الكثافة) الذي يفعل في متجهات موجة لعدد ما N من الجسيمات تنتمي إلى فضاء هيلبرتي، يقابل فضاء الطور، هو جداء تانسوري لـ N فضاء هيلبرتي. يخضع هذا المؤثر إلى نفس القوانين التي تخضع لها الدالة ρ شريطة أن نستبدل بلامات بواسون بين الدالات المبادلات بين المؤثرات.

عرفنا في الفصل الأول مؤثر الكثافة وبرهنا مبرهنة ليوفيل التي يحققها كما تحقق دالة التوزع مبرهنة ليوفيل التقليدية بدون اللجوء إلى مبدأ المقابلة واتخذنا كافة التدابير لكي ينطبق تعريف الأنتروبية الكمومي - وكنا قد عرفناه في المجلد الثاني - على التعريف التقليدي، الفارق الوحيد أن مبدأ نرنست للأنتروبية التقليدية أصبح مبرهنة في الفيزياء الإحصائية. استطعنا بواسطة مؤثر الكثافة حساب القيمة الوسطية للعزم المغنطيسي في المواد مسايرة التمغنط، دراسة الغاز الكامل الكمومي وحل مسألة الحرارة النوعية للأجسام الصلبة.

انتقلنا في الفصل الثاني إلى وضع أسس الإحصاء الكمومي الذي يختلف عن التقليدي في أمرين، هما عدم التمييز بين الجسيمات المتطابقة ومبدأ الاستبعاد لباولي وما ينتج عنه من وجود نوعين من الجسيمات، متجهات موجة النوع الأول متناظرة، سبينها عدد صحيح، هي البوزونات؛ ومتجهات موجة النوع الثاني مضادة التناظر، سبينها عدد نصف صحيح، هي الفيرميونات. تخضع أعداد هذين النوعين إلى إحصائين مختلفين هما إحصاء بوز–آنشتاين للبوزونات وإحصاء فيرمي–ديراك للفيرميونات. درسنا حالتي الغاز البوزوني المتدني والغاز الفيرميوني المتدني وبينا كيف ننتقل عند ارتفاع درجة الحرارة – في الطاقات العالية، من هذين الإحصائين إلى إحصاء وحيد يزيل التفريق بين البوزون والفيرميون هو توزع بولتزمان–ماكسويل التقليدي. إن عدد الجيسمات هو، ككل مقدار فيزيائي في ميكانيك الكم، مؤثر ألزمنا باللجوء إلى التكميم الثاني الذي عالجناه في المجلد السابق.

عدنا، كما فعلنا في الفصل الأول، لدراسة فشل الترموديناميك التقليدي الثاني، إشعاع الجسم الأسود وتخلصنا من عيوب قانون فين وكارثة الإشعاع تحت البنفسجي مبينين في الوقت ذاته مدى نجاح النظرية التقليدية في إعطاء نتائج أيدتها الفيزياء الإحصائية تأييداً تاماً.

إن نظرية الإلكترونات في المعادن نظرية صعبة ومعقدة ولذا فقد اكتفينا في هذا الفصل بدراسة حركة الإلكترونات المتنابذة مهملين تأثير الحقل الكهربائي الجاذب والدوري الذي تحدثه ذرات الشبكة البلورية.

إن جل الفصل الثالث مكرس لدراسة الفيزياء الإحصائية للجسم الصلب. ومما يسهل هذه الدراسة إقران الاهتزازات – الموجات – المنتشرة في الشبكة البلورية بأشباه جسيمات كالفونون مثلاً المقترن بالأمواج الصوتية على وزن الفوتون المقترن بالأمواج الكهرطيسية. إن قرن الموجة بجسيم – شبه جسيم بينا الفرق بينه وبين الجسيم العادي – لا يقل أهمية عن قرن الجسيم بموجة كما فعلنا في ميكانيك الكم. درسنا في هذا الفصل حركة الإلكترونات في حقل دوري وخواص المواد الموصلة والعازلة وأصناف الموصلات ثم

المغنطيسية الحديدية من وجهة نظر مجهرية إحصائية، تفاعل الاستبدال الكهربائي الراكد بين سبينين، بعد أن درسناها في المجلد الثالث من وجهة نظر جهرية. انتقلنا إلى دراسة فائقية توصيل المعادن في درجات الحرارة المنخفضة المكتشفة في عام 1911 والتي لم تجد تفسيراً لها إلا في عام 1958. إنه وضوع هام من الناحيتين النظرية والتطبيقية على حد سواء؛ خاصة بعد اكتشاف فائقية التوصيل في درجات الحرارة المرتفعة (درجة حرارة الآزوت السائل!) في أوئل ثمانينات القرن العشرين. فقد ضرب عدد براءات الاختراع في هذا الموضوع رقماً قياسياً.

يحتل الباحثون في فيزياء درجات الحرارة المنخفضة مركزاً مرموقاً في عدد من حاز منهم على جائزة نوبل، وإن لم يكن لأبحاثهم في بعض الأحيان أي تطبيق عملي على المدى المنظور. هذا هو حال فائقية السيولة التي لا تزال موضوع عمل مخبري صرف والتي كرسنا لها الفقرة الأخيرة من هذا الفصل. ليسمح لي القارئ، ولمرة واحدة في كل هذا الكتاب، بالخروج عن الموضوع العلمي لأروي ما جرى حين كتابتي لهذه الفقرة : وصلت في آخر العرض إلى فائقية سيولة الهليوم He^3 – وهو نظير نادر جداً – في درجة الحرارة $0,0025K°$ (وحصل مكتشفوها على جائزة نوبل 1996) فتوقفت متسائلاً ما هي أهمية هذه النتيجة للقارئ العربي ؟ وما أهمية هذه الفقرة بكاملها ؟ كدت أحذفها لولا أني تذكرت حادثة قديمة في منتصف العقد السادس من القرن الماضي. كنت في المركز الدولي للفيزياء النظرية، بضع سنوات بعد تأسيسه من قبل عبد السلام – ولم يكن يحمل آنذاك جائزة نوبل –، حين جاء عدد من مجلس المحافظين للوكالة الدولية للطاقة الذرية لزيارة المركز ومناقشة موازنته الزهيدة. طلب مني عبد السلام الإجتماع بعضو متنفذ فيهم من المشككين بأهمية المركز للعلم في العالم الثالث. قلت له أثناء النقاش بأي حق تريدون منع الفقراء من النظر إلى النجوم ومعرفة ما يجري فيها !؟

خصصنا الفصل الرابع لنظرية الإضطرابات في الفيزياء الإحصائية، نشر مؤثر الكثافة على مثال نشر مؤثر التطور في نظرية الكم ونظرية الحقول المكممة، شريطة استبدال درجة الحرارة T بزمن تخيلي هو $\frac{it}{\hbar}$. ومن ثم استعمال دالات غرين ومخططات فاينمان فيها. يشبه هذا الفصل بضعة فصول وفقرات أخرى في هذا الكتاب، من حيث وقوعه على حدود ما يتطلب معرفته في الفيزياء العامة قبل الدخول في مجالات التخصص المختلفة. يتيح الوصول إلى حدود البرامج المعتادة رؤية الآفاق الواسعة أمام من يريد الازياد من العلم.

فهرس

مقدمة الكتاب III

مقدمة VII

الفصل الأول: أسس الإحصاء الكمومي والترموديناميكي 1

1. مؤثر الكثافة 1

1.1- الإحصاء الكمومي 1

2.1- مؤثر الكثافة (المؤثر الإحصائي) 4

3.1- مبرهنة ليوفيل 7

4.1- الأنتروبية الكمومية 10

2. حساب مؤثر الكثافة 14

1.2- التوزع القانوني (جيبس) Gibbs 14

2.2- دالة التجزئة وحساب القيم الوسطية 16

3.2- تعريف الأنتروبية الكمومية ونظرية الإعلام 20

3. تطبيقات 22

1.3- المغنطيسية المسايرة 22

2.3- الغاز الكامل الكمومي 26

3.3- الهزاز التوافقي الخطي 27

4.3- التقريب شبه التقليدي، تقريب بولتزمان لغاز وحيد الذرات 30

4. حرارة الجسم الصلب النوعية 33

1.4- اهتزازات نظمة ذات s درجة حرية 33

2.4- الأجسام الصلبة 35

3.4- حالة درجات الحرارة المنخفضة 36

4.4- درجات الحرارة المرتفعة 38

5.4- صيغة تقريب دوباي 40

[illegible] الأجسام الصلبة الحرارية 42

ملحق الفصل الأول 45

الفصل الثاني: التوزع القانوني الكبير 51

1. الفيرميونات والبوزونات 51

1.1- الجسيمات المتطابقة ومبدأ عدم التمييز 51

2.1- مؤثر الاستبدال Exchange – المستبدل 52

3.1- البوزونات والفيرميونات 54

4.1- الفضاء متعدد الجسيمات 55

2. التوزع القانوني الكبير 56

1.2- مؤثر الكثافة التابع لعدد الجسيمات 56

2.2- الصيغة العامة لمؤثر الكثافة 58

3.2- حساب عدد الجسيمات، توزع فيرمي-ديراك، وبوز-أنشتاين 61

4.2- معادلة حالة الغاز الفيرميوني والغاز البوزوني 63

5.2- الغاز الكامل خارج حالة التوازن 68

3. خواص الغاز في جوار الصفر المطلق 69

1.3- الغاز الإلكتروني المتدني 69

2.3- الغاز البوزوني المتدني 75

3.3- الإشعاع الأسود 79

4. الغاز الإلكتروني في المعادن 87

1.4- متجهة حالة الغاز الإلكتروني 87

2.4- الأمواج الصوتية في الغاز الإلكتروني 90

3.4- حساب التباعد بين الإلكترونات 92

4.4- طاقة الترابط 94

الفصل الثالث: المادة المكثفة 97

1. الجسم الصلب 97

1.1- التناظر البلوري 97

2.1- الشبكة المعكوسة Reciprocal 99

3.1- قانون تشتت الموجات Dispersion 100

4.1- أشباه الجسيمات Quasiparticles والتفاعلات الجماعية 104

5.1- الفونونات 105

6.1- كثافة عدد الفونونات 106

2. الإلكترون في حقل دوري، الموصلات والعوازل 109

1.2- دالة بلوخ Bloch 09

2.2- حساب السرعة الوسطية 12

3.2- التشتت في بعد واحد 14

4.2- تانسور الكتلة الإلكترونية الفعالة 18

5.2- تصنيف الأجسام الصلبة وفق طيف الطاقة الإلكترونية 20

6.2- تعيين الكمون الكيميائي 24

3. المغنطيسية الحديدية 27

1.3- التفاعل الكهربائي بين السبينات 27

2.3- تقريب الحقل الجزيئي Molecular لـ فيس Weiss 29

3.3- التبريد المغنطيسي الكظوم 3

4.3- قياس درجات الحرارة في جوار الصفر المطلق 7

4. فائقية التوصيل 8

1.4- النتائج التجريبية 8

2.4- المعالجة الترموديناميكية ....

3.4- مفعول مايسنر وقفزة الطاقة ....

4.4- هاميلتوني مفعول كوبر ....

5.4- قفزة الطاقة ....

6.4- المقادير الترموديناميكية ....

5. فائقية السيولة Superfluidity ....

1.5- الخواص الأساسية للهليوم المائع ....

2.5- الإثارات الأولية في السائل الكمومي البوزوني ....

2.1- الشبكة المعكوسة Reciprocal 99
3.1- قانون تشتت الموجات Dispersion 100
4.1- أشباه الجسيمات Quasiparticles والتفاعلات الجماعية 104
5.1- الفونونات 105
6.1- كثافة عدد الفونونات 106

2. الإلكترون في حقل دوري، الموصلات والعوازل 109

1.2- دالة بلوخ Bloch 109
2.2- حساب السرعة الوسطية 112
3.2- التشتت في بعد واحد 114
4.2- تانسور الكتلة الإلكترونية الفعالة 118
5.2- تصنيف الأجسام الصلبة وفق طيف الطاقة الإلكترونية 120
6.2- تعيين الكمون الكيميائي 124

3. المغنطيسية الحديدية 127

1.3- التفاعل الكهربائي بين السبينات 127
2.3- تقريب الحقل الجزيئي Molecular لـ فيس Weiss 129
3.3- التبريد المغنطيسي الكظوم 133
4.3- قياس درجات الحرارة في جوار الصفر المطلق 137

4. فائقية التوصيل 138

1.4- النتائج التجريبية 138
2.4- المعالجة الترموديناميكية 140
3.4- مفعول مايسنر وقفزة الطاقة 143
4.4- هاميلتوني مفعول كوبر 146
5.4- قفزة الطاقة 149
6.4- المقادير الترموديناميكية 152

5. فائقية السيولة Superfluidity 154

1.5- الخواص الأساسية للهليوم المائع 154
2.5- الإثارات الأولية في السائل الكمومي البوزوني 158

3.5- الفونون والروتون Roton 160

4.5- فائقية السيولة 162

الفصل الرابع: نظرية الاضطرابات 167

1. النشر الاضطرابي لمؤثر الكثافة 167

1.1- معادلة بلوخ Block 167

2.1- النشر الاضطرابي لمؤثر الكثافة 171

3.1- النشر الاضطرابي لطاقة هيلمهولتز الحرة 174

2. دالات غرين 177

1.2- دالة غرين لنظمة جهرية 177

2.2- مصفوفة الكثافة 180

3.2- تعيين طيف الطاقة الفيرميونية بدليل دالة غرين 183

4.2- دالة غرين للغاز الكامل الفيرميوني 186

5.2- دالة غرين للبوزونات 189

6.2- دالة غرين المؤخرة والمسبقة 191

3. مخططات فاينمان 194

1.3- مبرهنة فيك Wick 194

2.3- ناشر فاينمان (دالة غرين) في الفيزياء الإحصائية 196

3.3- مبرهنة فيك المعممة في الفيزياء الإحصائية 200

4.3- تمثيل الاضطراب بمخططات 202

5.3- المَخططات المتناظرة 206

6.3- المخططات المترابطة Connexe 208

7.3- قواعد حساب المخططات 211

ثبت المصطلحات 213

أسماء العلم 219

الفصل الأول

أسس الإحصاء الكمومي والترموديناميكي

1- مؤثر الكثافة............................ 1

2- حساب مؤثر الكثافة..................... 14

3- تطبيقات................................ 22

4- حرارة الجسم الصلب النوعية.............. 33

الفصل الأول: أسس الإحصاء الكمومي والترموديناميكي

1. مؤثر الكثافة

1.1- الإحصاء الكمومي

استندت دراسة الترموديناميك في المجلد الثاني على ركيزتين أساسيتين، أولاهما الميكاميك التقليدي الذي يعالج مسائل تفاعل جسمين وبشكل أعم مسائل حركة جسم في حقل ناتج عن وجود عدة أجسام أخرى؛ فيحدد المعادلات التفاضلية التي تخضع لها حركة الجسم ويعطي الحلول المضبوطة أو التقريبية لها. والركيزة الثانية هي الميكانيك الإحصائي الذي يعنى بدراسة تفاعل عدد كبير جداً (عدد آفوغادرو) من الجسيمات، الجزيئات والذرات، يستحيل معه تتبع حركة الجسيمات فرداً فرداً، معرفة الشروط البدائية في اللحظة t_0 لحركتها قبل تصادمها وفي اللحظة t_0' بعد تصادمها. لكن معرفة حركة الجسيمات، حتى بفرض عدم استحالتها لا تجدي نفعاً لأن المهم في حالة الأعداد الكبيرة هو إيجاد مفاهيم جديدة، بمعنى أنها لا تدخل في إطار الميكانيك، تعبر عن الخواص الجماعية – التي نسميها الجهرية لتمييزها عن خواص كل جسيم على حدة، خواصه المجهرية – لنظمة الأعداد الكبيرة التي ندرسها. وهكذا فقد عينا مجموعات إحصائية مؤلفة من عدد كبير جداً من النظمات الميكانيكية الخاضعة لذات الشروط الخارجية، ذات الحقل الكهربائي $\vec{E}$ أو المغنطيسي $\vec{B}$ وذات الكمون (حاجز الكمون) الذي تمثله جدران الوعاء الخ. سميناها الحالات المتاحة Accessible وعبرنا عن الخواص الجماعية بشكل خاص بإعطاء القيم الوسطية وهي القيم ذات الاحتمال الأعظم وعرفنا التوازن الإحصائي–الترموديناميكي بالقول إنه حالة النظمة التي تأخذ فيها المقادير الترموديناميكية قيمها الوسطية.

تتعين حالة نظمة ميكانيكية مؤلفة من N جسيماً ذات s درجة حرية بنقطة في فضاء طور ذي $2s$ بعداً $q^1 \dots q^s; p_1 \dots p_s$ في لحظة t_0 ويتعين تطورها مع الزمن بمسار، بمنحنٍ في هذا الفضاء. أما عندما تكون الشروط البدائية غير يقينية فيصبح تطابق النقطة مع حالة النظمة مجرد احتمال عبرنا عنه بدالة التوزع الإحصائي $\rho(p, q)$ ونظمنا الاحتمال للواحد بالعلاقة

$$\int_\Gamma \rho(p, q, t)\, dpdq = 1 \tag{1.1}$$

$dqdq$ كتابة مختصرة للتكامل المضاعف على $2s$ متغيراً، Γ حجم الحالات المتاحة. ثم برهنا (مبرهنة ليوفيل في الميكانيك الإحصائي) ((II.1.(2.10)) أن

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \{H, \rho\} = 0 \tag{1.2}$$

حيث H هاميلتوني النظمة الميكانيكية و $\{\,,\,\}$ لامتا بواسون. وجدنا كذلك أن ((II.1.(2.12))

$$Ln\rho = \alpha + \beta E \tag{1.3}$$

حيث E الطاقة الوسطية و α و β ثابتتان.

أعطينا للأنتروبية أعم تعريف لها بكونها لوغاريتم عدد الحالات المتاحة العدود وكتبنا ((II.1.(4.4))

$$S = Ln\Gamma \tag{1.4}$$

ووجدنا أنها في الحالة التقليدية

$$S = Ln\Delta p\Delta q = -Ln\rho(\langle E\rangle) \tag{1.4'}$$

حيث $\Delta p\Delta q$ هو الحجم المكامل عليه في فضاء الطور. إنها غير ذات أبعاد في التعريف العام في حين أن لها أبعاد لوغاريتم فعل مرفوع إلى القوة s في التعريف التقليدي. أتاح لنا الانطلاق من الميكانيك الإحصائي لدراسة الترموديناميك إرساءه على أسس متينة وواضحة في آن واحد. فلم يعد لمفهوم درجة الحرارة الغموض واللبس اللذان يعترِيانه في الترموديناميك التقليدي. إنها ببساطة مقلوب مشتق الأنتروبية بالنسبة للطاقة ((II.2.(1.2)).

$$\frac{dS}{dE} = \frac{1}{T} \tag{1.4''}$$

فهي إذاً طاقة موجبة دوماً، تقاس كما تقاس الطاقة، تعبر عن خاصة جماعية (يقابل الطاقة الوسطية لكل درجة حرية درجة حرارة $\frac{T}{2}$) تجعلنا نتخلى عن درجة الحرارة المرصودة التي لا تقبل خاصة الجمعية والتي تختلف باختلاف الوسيط الترمومتري.

أوصلتنا دراسة الترموديناميك القائمة على الميكانيك الإحصائي التقليدي إلى خواص تتفق بشكل مرموق مع النتائج التجريبية ولكنها أخفقت في أمرين هامين أحدهما العلاقة بين النسبة بين الحرارتين النوعيتين في ضغط ثابت وفي حجم ثابت، $\gamma = \frac{c_p}{c_v}$، وبين عدد درجات الحرية s، العلاقة ((II.3.(2.43)) غير المحققة تجريبياً

$$\gamma - 1 = \frac{2}{s} \tag{1.5}$$

وهو إخفاق أشار إليه ماكسويل منذ عام 1861. والثاني تناسب كثافة الإشعاع الطيفي $u(\nu, T)$ المتناسبة مع مربع التواتر (قانون فين) ((II.3.(4.18)) المؤدي إلى تكامل متباعد عندما نجمع على كل التواترات وهو ما يعرف باسم كارثة ما تحت البنفسجي والتي أدت كما أشرنا فيه حينه إلى ولادة الميكانيك الكمومي.

وهكذا فكما أن الميكانيك التقليدي هو تقريب أولي لميكانيك الكم فإن الميكانيك الإحصائي التقليدي : دالة التوزع الإحصائي (1.1) وتوزعات ماكسويل وبولتزمان تقريبات لنظرية إحصائية عامة تنطلق من الميكانيك الكمومي يمكن تطبيقها على جميع فروع الفيزياء هي الفيزياء الإحصائية موضوع هذا المجلد.

إن ما يميز ميكانيك الكم هو رفضه لمفهوم المسار الناتج عن مبدأ اللاتحديد لهايزنبرغ الذي يمنع معرفة وضع واندفاع نظمة ميكانيكية ما – جسيم متحرك في حقل خارجي – بدقة كبيرة في آن واحد وبالتالي يمنع تحقيق الشروط البدائية التي تحدد المسار وهكذا فلا معنى في الإحصاء الكمومي للعلاقة (1.1) التي أسست للميكانيك الإحصائي التقليدي. هذا من جهة، ومن جهة أخرى فإن ما يميز ميكانيك الكم عن الميكانيك النيوتوني والنسبوي هو إعطاءه بنية احتمالية للمادة : ليست المعلومات التي تتيحها دالة الموجة $\left|\psi\left(q^i, p_i\right)\right|$، حيث q^i الإحداثيات العامة و $p_i = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q^i}$ الاندفاعات العامة، معلومات تامة فهي على سبيل المثال تجهل كل شيء عن اندفاع الجسيمات عندما تتيح العلم اليقين بأوضاعها في فضاء الهيئة (فضاء الإحداثيات) والعكس بالعكس : إن معرفة الشروط البدائية مستحيل من حيث المبدأ في ميكانيك الكم وكل معرفة هي معرفة احتمالية (إحصائية) تعينها كثافة الاحتمال $\left|\psi^2\right| = \bar{\psi}\psi$ حيث تشير العارضة إلى العدد العقدي المرافق. تتألف المجموعات الإحصائية في ميكانيك الكم من متجهات حالة نتجت عن قياس نظمة تامة من المقادير الرصودة هي مجموعة الحالات المتاحة. إن احتمال الحالة يساوي الواحد ونقول عندئذ إن النظمة حالة نقية؛ أو بتعبير آخر إن دالة الموجة (متجهة الحالة) هي يقيناً تلك التي عينها قياس النظمة التامة من المقادير الرصودة. لقد بنينا كل المجلد الرابع على دراسة الحالات النقية : متجهة حالة معدة نتيجة قياس نظمة تامة من المقادير الرصودة في اللحظة t_0، تخضع لمعادلة شرودينغر التي تحدد احتمال حصول مقدار رصود على قيمة معينة في اللحظة t، التحقق من هذا الاحتمال بالقياس التجريبي – على المجموعة الإحصائية، مجموعة الحالات المتاحة النقية، وتعيين حالة نقية جديدة في اللحظة t.

إلا أن إعداد النظمة الكمومية في حالة نقية ليس بالأمر السهل؛ أو الممكن عندما تكون النظمة جهرية. لنأخذ الطاقة على سبيل المثال كمقدار رصود لنظمة كمومية معزولة. هل يمكن للطاقة أن تأخذ قيماً محددة ؟ نعلم أنه لا معنى لقيمة محددة عندما يصبح الطيف طيفاً متصلاً وأن هذا ما يحدث دوماً عندما تتوقف الطاقة على عدد كمومي صحيح n يأخذ قيماً كبيرة. هذا ما رأيناه في طيف ذرة الهدروجين ((IV.3.(3.13)).

$$E_n = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} = -\frac{E_R}{n^2}$$

و

$$\left|E_{n+1} - E_n\right| \sim \frac{1}{n^2} \underset{n\to\infty}{\to} 0$$

رأينا كذلك أن طاقة جسيم كتلته m واقع في بئر أبعاده d_1, d_2, d_3 تتوقف على ثلاثة أعداد كمومية صحيحة n_1, n_2, n_3 تحددها العلاقة ((IV.2.(2.24))

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{d_1^2} + \frac{n_2^2}{d_2^2} + \frac{n_3^2}{d_3^2}\right)$$

يمكننا تمثل بئر الكمون بجدران الوعاء الذي يحول دون مغادرة الجسيم للوعاء والنظر إلى نظمة كمومية مؤلفة من N جسيماً من هذا القبيل لا تتفاعل فيما بينها كغاز كامل كمومي، طاقته عندما يأخذ الوعاء شكل مكعب ضلعه $d = d_1 = d_2 = d_3$ هي

$$E = \sum_{i=1}^{N} E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2md^2}\sum_{i=1}^{N}\bar{n}_i^{\,2} \qquad (1.6)$$

حيث $\bar{n}_i = n_{1_i}, n_{2_i}, n_{3_i}$ من أجل كل جسيم و n_i أعداد صحيحة تأخذ كل القيم الممكنة، عددها 3N.

إن تحديد قيمة محددة بدقة للطاقة في (1.6) أمر مستحيل نظراً للكثافة الهائلة لمستويات الطاقة ولا يمكن والحال هذه أن تكون متجهة الحالة متجهة حالة مستقرة تعين قيمة مضبوطة للطاقة.

هناك سبب آخر يجعل من المستحيل أن تكون نظمة كمومية جهرية معزولة في حالة مستقرة، منشؤه علاقة اللاتحديد بين الزمن والطاقة ('(IV.(4.(3.25) : إن القياس، أي التفاعل مع جهاز القياس التقليدي هو الذي يحدد قيم المقادير الرصودة، قيمة الطاقة "المستقرة" على وجه التخصيص. لتكن E و E' قيمتي هذه الطاقة قبل وبعد القياس. نكتب العلاقة بين لادقة هاتين القيمتين على الشكل

$$|\Delta E' - \Delta E| \sim \frac{\hbar}{\Delta t}$$

حيث Δt مدة القياس. إن ΔE و $\Delta E'$ من نفس الرتبة ويستحيل أن نجعل $\Delta E'$ صغيرة جداً أمام ΔE أي أن $\frac{\hbar}{\Delta t} \sim \Delta E'$. يجب أن تكون $\Delta E'$ صغيرة أمام الفرق (الصغير هو أيضاً) بين مستويي طاقة متجاورين حتى نستطيع القول إن E' ثابتة ويجب بالتالي أن يدوم القياس مدة لامتناهية $\Delta t \to \infty$ حتى نتمكن من القول إن الحالة مستقرة.

2.1– مؤثر الكثافة (المؤثر الإحصائي)

نرى مما سبق أن متجهة الحالة النقية $|\psi\rangle$ التي توصف النظمة الكمومية أحسن توصيف ليست متاحة عندما تتألف النظمة من عدد كبير من الجسيمات، كما أن معرفتها ليست ضرورية في المعالجة الإحصائية التي تعنى بالخواص الجماعية للنظمة على غرار الشروط البدائية التقليدية التي يستغني الترموديناميك (والميكانيك الإحصائي التقليدي المؤسس له) عنها. سنفرض إذاً أن النظمة الجهرية موصفة بعدد من متجهات الحالة نرمز لها لـ $|1\rangle$، $|2\rangle$ ... $|n\rangle$ ... وأن احتمال وجودها في الحالة $|m\rangle$

هو p_m. نقول عندئذ إن النظمة معدة في حالة مزيج من الحالات mixed states. والحالة النقية حالة خاصة من حالات المزيج تنعدم فيها كل الاحتمالات p_m ماعدا واحدة $p_i = 1$.

سنفترض أن متجهات الحالة منظمة للواحد $\langle i|i\rangle = 1$ ولكن ما من سبب يدعونا للقول إنها متعامدة. ولنفرض أننا نقيس القيمة الوسطية التي يأخذها المقدار الفيزيائي، المؤثر ذاتي الترافق A في هذه النظمة. رأينا أن هذه القيمة في حال توصيف النظمة الكمومية بمتجهة حالة نقية $\langle i|$، أو بشكل أدق عندما تتألف المجموعة الإحصائية من حالات نقية، هي حسب (((IV.(1.(2.17 التي نظرنا إليها كمبدأ في ميكانيك الكم

$$\langle A\rangle = \langle i|A|i\rangle \qquad (1.7)$$

نعمم هذا المبدأ – التعريف في ميكانيك الكم إلى المبدأ التالي في الإحصاء الكمومي.

مبدأ 1 :

إن القيمة الوسطية للمؤثر A عندما تكون متجهة حالة النظمة مزيجاً – وبشكل أدق عندما تتألف المجموعة الإحصائية من هذه الحالات المزيجة – هي

$$\langle A\rangle = \sum_i p_i \langle i|A|i\rangle \qquad (1.8)$$

لنلاحظ أن القيمة الوسطية لـ A في الحالة النقية (1.7) عندما تكون متجهة الحالة $\langle i|$ متجهة خاصة لـ A هي القيمة الخاصة a_i. وكذلك الأمر في حالة المزيج، فإذا كانت كل متجهات الحالة المزيج متجهات خاصة لـ A – وهي متعامدة عندئذ – تقابلها القيم الخاصة a_i فإن القيمة الوسطية لـ A في (1.8) هي

$$\langle A\rangle = \sum_i p_i a_i$$

نستعيد هنا تعريفنا لمؤثر الكثافة وللقضية التي تحدد القيمة الوسطية لـ A بواسطته (IV.1§4).

نسمي مؤثر الكثافة أو مصفوفة الكثافة ونرمز لها بـ ρ المؤثر المسقط

$$\rho = \sum_i p_i |i\rangle\langle i| \qquad (1.9)$$

قضية 1 :

إن القيمة الوسطية المعرفة بـ (1.8) معطاة بالعلاقة

$$\langle A\rangle = \mathrm{Tr}\rho A \equiv \sum_{k,m} \rho_{km} A_{mk} \qquad (1.10)$$

حيث تشير Tr إلى أثر (Trace) المصفوفة، إلى مجموع عناصرها القطرية[1].

---

[1] لنذكر أن أثر المصفوفة عدد سلمي مستقل عن اختيار القاعدة ذلك أن المصفوفة، M، تانسور من الرتبة الثانية عناصره M_{ij} وتقليصه إلى M_{ii} يخفض الرتبة درجتين أي إلى الرتبة صفر (عدد سلمي).

هو p_m. نقول عندئذ إن النظمة معدة في حالة مزيج من الحالات mixed states. والحالة النقية حالة خاصة من حالات المزيج تنعدم فيها كل الاحتمالات p_m ماعدا واحدة $p_i = 1$.

سنفترض أن متجهات الحالة منظمة للواحد $\langle i|i\rangle = 1$ ولكن ما من سبب يدعونا للقول إنها متعامدة. ولنفرض أننا نقيس القيمة الوسطية التي يأخذها المقدار الفيزيائي، المؤثر ذاتي الترافق A في هذه النظمة. رأينا أن هذه القيمة في حال توصيف النظمة الكمومية بمتجهة حالة نقية $|i\rangle$، أو بشكل أدق عندما تتألف المجموعة الإحصائية من حالات نقية، هي حسب (IV.(1.(2.17))) التي نظرنا إليها كمبدأ في ميكانيك الكم

$$\langle A\rangle = \langle i|A|i\rangle \tag{1.7}$$

نعمم هذا المبدأ – التعريف في ميكانيك الكم إلى المبدأ التالي في الإحصاء الكمومي.

مبدأ 1 :

إن القيمة الوسطية للمؤثر A عندما تكون متجهة حالة النظمة مزيجاً – وبشكل أدق عندما تتألف المجموعة الإحصائية من هذه الحالات المزيجة – هي

$$\langle A\rangle = \sum_i p_i \langle i|A|i\rangle \tag{1.8}$$

لنلاحظ أن القيمة الوسطية لـ A في الحالة النقية (1.7) عندما تكون متجهة الحالة $|i\rangle$ متجهة خاصة لـ A هي القيمة الخاصة a_i. وكذلك الأمر في حالة المزيج، فإذا كانت كل متجهات الحالة المزيج متجهات خاصة لـ A – وهي متعامدة عندئذ – تقابلها القيم الخاصة a_i فإن القيمة الوسطية لـ A في (1.8) هي

$$\langle A\rangle = \sum_i p_i a_i$$

نستعيد هنا تعريفنا لمؤثر الكثافة وللقضية التي تحدد القيمة الوسطية لـ A بواسطته (IV.1§4).

نسمي مؤثر الكثافة أو مصفوفة الكثافة ونرمز لها بـ ρ المؤثر المسقِط

$$\rho = \sum_i p_i |i\rangle\langle i| \tag{1.9}$$

قضية 1 :

إن القيمة الوسطية المعرفة بـ (1.8) معطاة بالعلاقة

$$\langle A\rangle = \mathrm{Tr}\rho A \equiv \sum_{k,m} \rho_{km} A_{mk} \tag{1.10}$$

حيث تشير Tr إلى أثر (Trace) المصفوفة، إلى مجموع عناصرها القطرية[1].

---

[1] لنذكر أن أثر المصفوفة عدد سلمي مستقل عن اختيار القاعدة ذلك أن المصفوفة، M، تانسور من الرتبة الثانية عناصره M_{ij} وتقليصه إلى M_{ii} يخفض الرتبة درجتين أي إلى الرتبة صفر (عدد سلمي).

لدينا فعلاً من تعريف ρ

$$\mathrm{Tr}\rho A = \sum_i p_i \mathrm{Tr}|i\rangle\langle i|A \qquad (1)$$

وبما أن $|i\rangle\langle i|$ مسقط P_i يحقق العلاقة $P_i^2 = P_i$ فإن كل حد من حدود (1) هو

$$\mathrm{Tr}|i\rangle\langle i|A \equiv \mathrm{Tr}P_iA = \mathrm{Tr}P_i^2A = \mathrm{Tr}P_iAP_i \qquad (2)$$

حصلنا على المساواة الأخيرة نظراً لتبادلية الأثر :

$$\mathrm{Tr}\,ABC = \sum_{i,j,k} A_{ij}B_{jk}C_{ki} = \sum_{k,i,j} C_{ki}A_{ij}B_{jk} = \ldots$$

وهكذا فإن كل حد من حدود (1) هو

$$\mathrm{Tr}\,|i\rangle\langle i|A|i\rangle\langle i| \qquad (3)$$

إن $\langle i|A|i\rangle = A_{ii}$ هو عنصر المصفوفة A القطري و $|i\rangle\langle i|$ هي المصفوفة التي تنعدم كل عناصرها ماعدا العنصر القطري (ii) المساوي للواحد، $\mathrm{Tr}|i\rangle\langle i| = 1$ وهكذا فـ (3) هي $\langle i|A|i\rangle$ ومنه فإن (1) ينطبق على (1.8) وينتهي البرهان.

__لازمة__ :

إن

$$\mathrm{Tr}\rho = \sum_i p_i = 1 \qquad (1.11)$$

يكفي أن نأخذ كمؤثر A المؤثر الوحدة I، $I|i\rangle = |i\rangle$ لنرى من (1.8) أن

$$1 = \sum_i p_i = \mathrm{Tr}\rho I = \mathrm{Tr}\rho = \sum_i \rho_{ii}$$

لننظر إلى حالة أعم من المبدأ (1.7) ونظيره الإحصائي (1.8) وهي احتمال وقوع نتائج قياس قيم المؤثر A في حيز D من طيفه المنفصل أو المتصل. ليكن P_D المسقِط على الفضاء الجزئي $\mathscr{H}_D$ من الفضاء الهيلبرتي المؤلف من المتجهات الخاصة لـ A المقابلة للقيم الخاصة الواقعة في الحيز D. إن احتمال وقوع نتائج القياس في حيز القيم D عندما تكون متجهة الحالة النقية $|\psi\rangle$ هو

$$p_D = \langle\psi|P_D|\psi\rangle \qquad (1.7)'$$

سنقبل نظيرة هذه العلاقة من أجل حالة مزيج نستبدل فيها بـ ψ متجهات الحالة $|i\rangle$ واحتمال وقوعها p_i

$$p_D = \sum_i p_i \langle i|P_D|i\rangle \qquad (1.8)'$$

إن هذا المقدار هو تعريفاً القيمة الوسطية للمؤثر P_D وتساوي حسب (1.10)

$$\langle P_D\rangle = \mathrm{Tr}\rho P_D$$

3.1 – مبرهنة ليوفيل

يلعب مؤثر الكثافة، المصفوفة الإحصائية، في الإحصاء الكمومي الدور الذي تلعبه دالة التوزع الإحصائي في فضاء الطور والإحصاء التقليدي ولذا فقد احتفظنا بنفس الرمز ρ لهذين المقدارين. يتيح لنا مبدأ التقابل الانتقال من المعادلة التقليدية (1.2) المعبرة عن مبرهنة ليوفيل في الإحصاء التقليدي إلى ذات المبرهنة في الإحصاء الكمومي بمقابلة لامتي بواسون بالمبادل مضروباً بـ $\frac{i}{\hbar}$. وهكذا تصبح (1.2) في تمثيل هايزنبرغ، حتى يكون للاشتقاق معنى.

$$\frac{d\rho_H}{dt} = \frac{\partial \rho_H}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\rho, H]_H = 0 \qquad (1.12)$$

أضفنا الدليل H لنبين أن الحسابات تجري في تمثيل هايزنبرغ.

يمكننا الوصول إلى هذه النتيجة بالاشتقاق المباشر لـ (1.9) بالنسبة للزمن، لدينا من معادلة شرودينغر

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \sum_i p_i \left(\frac{\partial |i\rangle}{\partial t}\langle i| + |i\rangle \frac{\partial \langle i|}{\partial t} \right)$$

$$= \sum_i p_i \left(\frac{1}{i\hbar} H|i\rangle\langle i| - \frac{1}{i\hbar}|i\rangle\langle i|H^{\dagger} \right)$$

لكن $H = H^{\dagger}$ و

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[H, \rho] \qquad (1.12)'$$

إنها العلاقة بين الطرفين الثاني والثالث في (1.2).

نعلم من جهة أخرى أننا ننتقل من تمثيل شرودينغر إلى تمثيل هايزبرغ بفعل مؤثر التطور U، ولدينا من أجل أي مؤثر A، الذي نرمز له بـ A_S في تمثيل شرودينغر و A_H في تمثيل هايزنبرغ (IV.(1.(5.10.11)))

$$A_H = U^{-1} A_S U \qquad (1.13)$$

و

$$\frac{dA_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A_H, H_H] + \frac{\partial A_H}{\partial t} \qquad (1.14)$$

لنلاحظ أن الانتقال من تمثيل شرودينغر إلى تمثيل هايزنبرغ ينقل المبادل [,] إلى $U^{-1}[\ ,\ ]U$ وهكذا فإن '(1.12) في تمثيل هايزنبرغ هي

$$\frac{\partial \rho_H}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[H, \rho]_H$$

ومنه

$$\frac{d\rho_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\rho, H]_H + \frac{1}{i\hbar}[H, \rho]_H = 0$$

3.1– مبرهنة ليوفيل

يلعب مؤثر الكثافة، المصفوفة الإحصائية، في الإحصاء الكمومي الدور الذي تلعبه دالة التوزع الإحصائي في فضاء الطور والإحصاء التقليدي ولذا فقد احتفظنا بنفس الرمز ρ لهذين المقدارين. يتيح لنا مبدأ التقابل الانتقال من المعادلة التقليدية (1.2) المعبرة عن مبرهنة ليوفيل في الإحصاء التقليدي إلى ذات المبرهنة في الإحصاء الكمومي بمقابلة لامتي بواسون بالمبادل مضروباً بـ $\frac{i}{\hbar}$. وهكذا تصبح (1.2) في تمثيل هايزنبرغ، حتى يكون للاشتقاق معنى.

$$\frac{d\rho_H}{dt} = \frac{\partial \rho_H}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\rho, H]_H = 0 \qquad (1.12)$$

أضفنا الدليل H لنبين أن الحسابات تجري في تمثيل هايزنبرغ.

يمكننا الوصول إلى هذه النتيجة بالاشتقاق المباشر لـ (1.9) بالنسبة للزمن، لدينا من معادلة شرودينغر

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \sum_i p_i \left(\frac{\partial |i\rangle}{\partial t}\langle i| + |i\rangle \frac{\partial \langle i|}{\partial t} \right)$$

$$= \sum_i p_i \left(\frac{1}{i\hbar} H|i\rangle\langle i| - \frac{1}{i\hbar}|i\rangle\langle i|H^{\dagger} \right)$$

لكن $H = H^{\dagger}$ و

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[H, \rho] \qquad (1.12)'$$

إنها العلاقة بين الطرفين الثاني والثالث في (1.2).

نعلم من جهة أخرى أننا ننتقل من تمثيل شرودينغر إلى تمثيل هايزبرغ بفعل مؤثر التطور U، ولدينا من أجل أي مؤثر A، الذي نرمز له بـ A_S في تمثيل شرودينغر و A_H في تمثيل هايزنبرغ (IV.(1.(5.10.11)))

$$A_H = U^{-1} A_S U \qquad (1.13)$$

و

$$\frac{dA_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A_H, H_H] + \frac{\partial A_H}{\partial t} \qquad (1.14)$$

لنلاحظ أن الانتقال من تمثيل شرودينغر إلى تمثيل هايزنبرغ ينقل المبادل [,] إلى $U^{-1}[\ ,\ ]U$ وهكذا فإن '(1.12) في تمثيل هايزنبرغ هي

$$\frac{\partial \rho_H}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[H, \rho]_H$$

ومنه

$$\frac{d\rho_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\rho, H]_H + \frac{1}{i\hbar}[H, \rho]_H = 0$$

وهي النتيجة (1.12) التي حصلنا عليها بتطبيق مبدأ المقابلة. لا ننسى أن هذا المبدأ يعني على وجه الخصوص أن للنظير الكمومي للمقدار التقليدي نفس خواص هذا الأخير. تنطبق على المؤثر ρ كل النتائج الإحصائية التي استخلصناها من أجل الدالة $\rho(p,q)$: تعريف التوازن الإحصائي على سبيل المثال وعلاقة المؤثر ρ بالطاقة. ترينا العلاقة '(1.12) أن $\frac{\partial\rho}{\partial t}=0$ تعني أن ρ تبادلي مع الهاميلتوني H، أنه من الممكن كتابتهما على شكل قطري في آن واحد. لتكن المتجهات $|n\rangle$ متجهات خاصة لـ H تقابلها القيم الخاصة E_n؛ إنها متجهات خاصة للمؤثر ρ كذلك تقابلها القيم الخاصة $\rho_{nn}\equiv\rho_n$ ولدينا من أجل أي مؤثر (أي مقدار فيزيائي) في القاعدة $|n\rangle$ حسب (1.10)

$$\langle A\rangle=\sum_n \rho_{nn}A_{nn} \qquad (1.15)$$

وهكذا فإن ρ_n هو تعريفاً احتمال أخذ المقدار الفيزيائي A القيمة A_{nn} ولدينا من (1.10) كذلك، عندما لا يتوقف المؤثر A مباشرة على الزمن، العلاقة

$$\frac{\partial\langle A\rangle}{\partial t}=\mathrm{Tr}\left(\frac{\partial\rho}{\partial t}A+\rho\frac{\partial A}{\partial t}\right) \qquad (1.16)$$

إن الطرف الثاني يساوي الصفر إذا أضفنا إلى شرط استقلال A عن الزمن الشرط $\frac{\partial\rho}{\partial t}=0$ ومنه

<u>قضية 2</u> :

إن $\frac{\partial\rho}{\partial t}=0$ شرط لازم للتوازن الإحصائي – لاستقلال القيم الوسطية عن الزمن–، إنه التعبير الحقيقي عن مبرهنة ليوفيل. يعني هذا الشرط أن تبعية ρ للزمن، كما في حال الإحصاء التقليدي، تبعية لتكاملات أولية، لمقادير منحفظة، الطاقة والاندفاع الخطي والعزم الزاوي. ونكتب، باختيار نظمة محاور مرتبطة بالنظمة، العلاقة المقابلة لـ (1.3)

$$\mathrm{Ln}\rho_n=\alpha+\beta E_n \qquad (1.17)$$

لنقارن لتوضيح ما سبق بين متجهات الحالة النقية ومتجهات الحالة المزيج؛ ولتكن $|\psi\rangle$، لنقل في التمثيل q، متجهة حالة نقية معبر عنها في نظمة متجهات $|m\rangle$ غير متعامدة :

$$|\psi\rangle=\sum_m \alpha_m|m\rangle$$

إن احتمال وجود النظمة في الوضع q في لحظة معينة هو

$$|\psi|^2=\sum_{k,m}\bar{\alpha}_k\alpha_m\langle k|m\rangle \qquad (1.18)$$

والقيمة الوسطية لمؤثر ما A هي

$$\langle\psi|A|\psi\rangle=\sum_{k,m}\bar{\alpha}_k\alpha_m\langle k|A|m\rangle=\sum_{k,m}\bar{\alpha}_k\alpha_m A_{km}$$

يقابل هذه القيمة في الحالة المزيج (1.10)

$$\langle A\rangle = \sum_{k,m}\rho_{mk}A_{km}$$

أي أن ما يقابل $\bar{\alpha}_k\alpha_m$ في الحالة النقية هو عنصر المصفوفة ρ_{mk} في الحالة المزيج، وبالتالي فإن احتمال وجود متجهة الحالة المزيج، ونرمز لها بـ $\langle\psi|$، في التمثيل q وفي لحظة معينة هو حسب (1.18)

$$|\psi|^2 = \sum_{k,m}\rho_{mk}\langle k|m\rangle \quad (1.19)$$

لكن الأمثال ρ_{mk} هي تعريفاً مركبات المتجهة $\langle\rho|k\rangle$؛ إنها العمود k :

$$\rho|k\rangle = \sum_{m}\rho_{mk}|m\rangle$$

ومنه

$$|\psi|^2 = \sum_{k}\langle k|\rho|k\rangle \quad (1.19)'$$

أي أن احتمال وجود متجهة الحالة المزيج في عنصر الحجم dq هو

$$|\psi|^2 dq = \sum_{k}\langle k|\rho|k\rangle\cdot dq = \sum_{k}\rho_{kk}\cdot dq \quad (1.19)''$$

لا حاجة بنا للقول إنه لا يوجد في الإحصاء الكمومي ما يقابل كثافة الاحتمال التقليدي $\rho(p,q)dpdq$؛ فالمقداران p و q غير معرفين في آن واحد. إلا أن لدينا في التمثيل p صيغة مماثلة لكثافة احتمال متجهة الحالة المزيج "(1.19) في التمثيل q. لنتابع المقارنة بين الحالة النقية والحالة المزيج عندما تكون نظمة المتجهات $\langle m|$ متجهات حالة مستقرة (طاقة ثابتة). نكتب متجهة الحالة عندئذ على الشكل

$$\psi = \sum_{m}e^{-i\frac{E_m t}{\hbar}}|m\rangle$$

حيث $\langle m|$ مستقلة عن الزمن و $\alpha_m = e^{-i\frac{E_m t}{\hbar}}$. لدينا بالاشتقاق بالنسبة للزمن

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\alpha}_k\alpha_m) = \frac{i}{\hbar}(E_k - E_m)\bar{\alpha}_k\alpha_m$$

ويقابلها في الحالة المزيج

$$\frac{\partial}{\partial}\rho_{mk} = \frac{i}{\hbar}(E_k - E_m)\rho_{mk} \quad (1.20)$$

ونظراً لكون مصفوفة الهاميلتوني H قطرية في الحالة المستقرة فإن $E_k = \sum_{\ell}H_{\ell k}$ و

$$\rho_{mk}E_k = \sum_{\ell}\rho_{m\ell}H_{\ell k} \quad , \quad E_m\rho_{mk} = \sum_{\ell}H_{m\ell}\rho_{\ell k}$$

بحيث تأخذ (1.20) الشكل

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{mk} = \frac{i}{\hbar}\sum_{\ell}\rho_{m\ell}H_{\ell k} - H_{m\ell}\rho_{\ell k}$$

والطرف الثاني هو العنصر mk في المبادل $[\rho, H]$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{mk} = \frac{i}{\hbar}[\rho, H]_{mk}$$

إنها العلاقة '(1.12) مكتوبة من أجل كل عنصر من عناصر المصفوفة الإحصائية ρ؛ وكون هذه العناصر مستقلة عن الزمن يميز التوازن الإحصائي؛ إنه الشرط اللازم للتوازن : إن المقادير المنحفظة هي المقادير التبادلية مع الهاميلتوني و ρ قطرية في هذه الحالة كما نرى من (1.20).

4.1- الأنتروبية الكمومية

راينا في (1.15) أن $(\rho_{nn} = \rho_n)$ هو احتمال أخذ المقدار الفيزيائي، المؤثر A، القيمة A_{nn} وأنه بالتالي احتمال أخذ الهاميلتوني H القيمة $H_{nn} = E_n$، وبتعبير آخر أنه قيمة المؤثر ρ (التابع لـ E) في النقطة E_n نكتب بالتالي (1.17) على الشكل

$$Ln\rho(E_n) = \alpha + \beta E_n \qquad (1.17)'$$

وبما أن هذه الدالة خطية بـ E_n فإن

$$Ln\rho\left(\sum_n p_n E_n\right) = \sum_n p_n(\alpha + \beta E_n) = \sum_n p_n Ln\rho(E_n)$$

ومن تعريف القيمة الوسطية نحصل على

$$Ln\rho(\langle E\rangle) = \langle Ln\rho(E)\rangle \qquad (1.21)$$

نعرف الأنتروبية الكمومية ونرمز لها بـ S بالعلاقة التالية المقابلة للتعريف التقليدي '(1.4)

$$S = -\langle Ln\rho(E)\rangle = -Ln\rho(\langle E\rangle) = -Tr\rho Ln\rho \qquad (1.22)$$

لأن الطرف الأول هو تعريفاً $-Tr\rho Ln\rho$ حسب (1.10).

<u>قضية 3 :</u>

إن الأنتروبية المعرفة بـ (1.22) تساوي للوغاريتم عدد الحالات المتاحة Γ

$$S = -Tr\rho Ln\rho = Ln\Gamma \qquad (1.23)$$

نرمز بـ $\phi(E)$ لعدد الحالات الكمومية التي تقل طاقتها عن الطاقة E أو تساويها ونعرف عدد الحالات المتاحة للنظمة الكمومية في مجال طاقة منته $[E, E + \Delta E]$ بالعلاقة

$$\Gamma = \phi(E + \Delta E) - \phi(E) = \frac{d\phi}{dE}\Delta E$$

هذا من جهة، ومن جهة أخرى فإن كثافة الاحتمال بدليل الطاقة هي $\rho(E)\frac{d\phi}{dE}dE = \rho(E)d\phi$.

تنتظم هذا الاحتمال في مجال الطاقة المنتهي $[E, E + \Delta E]$

$$1 = \int_{E}^{E+\Delta E} \rho(E) \frac{d\phi}{dE} dE = \int_{E}^{E+\Delta E} p(E) dE$$

حيث $p(E)$ هو احتمال حصول الطاقة على القيمة E. نعلم أن للاحتمال قيمة عظمى من أجل الطاقة الوسطية وأنه يتناقص بشدة في جوار هذه القيمة، بحيث يمكن كتابة التكاملين أعلاه على الشكل

$$1 = \rho(\langle E \rangle) \frac{d\phi}{dE} \Delta E = p(\langle E \rangle) \Delta E$$

ومنه

$$\frac{d\phi}{dE} \Delta E = \Gamma = \frac{1}{\rho(\langle E \rangle)}$$

وبالتالي

$$Ln\Gamma = -Ln\rho(\langle E \rangle) = -\langle Ln\rho(E) \rangle$$

وهو المطلوب.

لا فرق إذاً بين تعريف الأنتروبية بدليل مؤثر الكثافة ρ وتعريفها في '(1.4) بدليل دالة التوزع الإحصائي $\rho(p, q)$، الفارق الأساسي هو انعدام أبعاد الأنتروبية في الحالة الكمومية بحيث يمكن اختيار مبدأ لقياس الأنتروبية – مقابلة درجة الحرارة المطلقة $T = 0$ بالأنتروبية $S = 0$ وهو أمر مستحيل في الإحصاء التقليدي حيث للأنتروبية المعرفة بـ $S = \Delta p \Delta q$ أبعاد فعل كما رأينا. نتخلص من هذه المشكلة في التقريب شبه التقليدي لبور – سومرفلد ((IV.(7.(1.29,30 الذي يقبل مفهوم المسار في فضاء الطور ولكنه لا يقابل النظمة الكمومية المؤلفة من N جسيماً بنقطة في هذا الفضاء وإنما بخلية أبعادها $2\pi\hbar$ من أجل كل درجة حرية. وهكذا فإن عدد الحالات المتاحة في فضاء طور ذي s درجة حرية ليس $\Delta q \Delta p = \Delta q^1 \dots \Delta q^s, \Delta p_1 \dots \Delta p_s$ وإنما

$$\Gamma = \frac{\Delta q \Delta p}{(2\pi\hbar)^s}$$

بحيث تصبح S في هذه الحالة غير ذات أبعاد، فقد حذف الفعل $\hbar$ في المخرج بعد الفعل $\Delta q^i \Delta p_i$، $i = 1, 2 \dots s$ وبالتالي فإن $\rho(p, q)$ المقيس بوحدة الحجوم في فضاء الطور يساوي لـ $(2\pi\hbar)^s \rho$ المقيس بالوحدة $(2\pi\hbar)^s$. نكتب إذاً حسب (1.21) و '(1.4)

$$S = -\langle Ln(2\pi\hbar)^s \rho \rangle \equiv -\int \rho Ln\left[(2\pi\hbar)^s \rho\right] dpdq \qquad (1.25)$$

لا يختلف الترموديناميك الكمومي عن الترموديناميك التقليدي في شيء، فالمقادير الترموديناميكية هي ذاتها: فدرجة الحرارة معرفة بـ $\frac{1}{T} = \frac{dS}{dE}$ وشروط التوازن الترموديناميكي هي ذاتها وكذا تعريف الحرارة النوعية بحجم ثابت أو بضغط ثابت والعلاقات بين المقادير الترموديناميكية ومختلف الطاقات $E(S, V)$،

$F(T,V)$، $\phi(T,P)$، $H(S,P)$. إن مجمل الفصل الثاني من كتاب الميكانيك الإحصائي والترموديناميك يبقى على حاله ماعدا المبدأ الثالث الذي يتحول إلى مبرهنة هي مبرهنة نيرنست.

مبرهنة نيرنست Nernst

تتناهى الأنتروبية S إلى حد أدنى يساوي الصفر عندما تتناهى درجة الحرارة (المطلقة) إلى الصفر.

يعتمد البرهان على أمرين أحدهما انعدام أبعاد الأنتروبية في الحالة الكمومية وثانيهما وجود طاقة دنيا – طاقة القاع – في ميكانيك الكم.

رأينا في ((II.(2.(4.18) أن الحرارة النوعية في حجم ثابت، c_V، موجبة دوماً وهي تعريفاً $c_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V > 0$، أي أن E دالة رتيبة متزايدة بدرجة الحرارة. حدها الأدنى يقابل درجة الحرارة $T = 0$. هذا الحد الأدنى هو طاقة القاع[2] لمجموع مكونات النظمة الكمومية الجهرية، أي أن لكل جزء – لكل جسيم – من النظمة طاقة محددة تماماً هي طاقة قاعه وبالتالي أن احتمال وجود الجزء في هذه الحالة يساوي 1 وجداء الاحتمالات يساوي 1 وبالتالي $S = 0$ حسب (1.22).

لازمة :

تتناهى الحرارة النوعية إلى الصفر عندما تتناهى درجة الحرارة إلى الصفر.

نكتب الحرارة النوعية على الشكل

$$C = T\frac{\partial S}{\partial T} = \frac{\partial S}{\partial LnT}$$

$LnT \underset{T\to 0}{\to} -\infty$ في حين تبقى الأنتروبية S منتهية (تتناهى إلى الصفر) ومنه $C \to 0$.

يصح الأمر كذلك على $\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P$ المساوية لـ $-\frac{\partial S}{\partial P}$ و $\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V$ المساوية لـ $\frac{\partial S}{\partial V}$ لأن S تتناهى إلى الصفر من أجل $T \to 0$ بشكل مستقل عن الضغط والحجم.

يتيح لنا تعريف الأنتروبية الكمومي كذلك تحويل الفرضية الثانية في الميكانيك الإحصائي القائلة بعودة نظمة جهرية وضعت خارج حالة التوازن الإحصائي إليه بعد زمن يطول أو يقصر سميناه زمن الارتخاء، إلى مبرهنة تعرف باسم المبرهنة H المنسوبة إلى بولتزمان والذي برهنها في حالات خاصة – عندما يكون التوزع الإحصائي هو توزع ماكسويل – عام 1872. نبرهنها هنا من وجهة نظر كمومية كما يلي :

---

[2] قد لا تصل النظمة إلى حالة القاع إلا في درجات حرارة منخفضة جداً (10^{-6}°K على سبيل المثال). هذا هو حال الذرات التي لنوياتها سبين نووي. تأخذ السبينات اتجاهات متعددة بدون أي ترتيب ولها بالتالي عدد كبير من درجات الحرية (من الحالات المتاحة) التي تسهم بإعطاء قيمة مختلفة عن الصفر (هذه هي المغنطيسية الحديدية النووية) ولا تأخذ أوضاعاً متوازية إلا في درجة الحرارة المذكورة (10^{-6}°K).

المبرهنة H :

لتكن لدينا الدالة

$$H = \langle Lnp \rangle = \sum_i p_i Lnp_i \qquad (1)$$

حيث p_i احتمال وجود النظمة في الحالة المتاحة $\langle i|$، إن

$$\frac{dH}{dt} \le 0 \qquad (2)$$

نعلم أن التفاعلات الضعيفة بين مختلف جسيمات النظمة الكمومية المعزولة تتيح لنا الانتقال من حالة كمومية متاحة $\langle i|$ إلى حالة متاحة أخرى $\langle j|$. سعة الانتقال بين هاتين الحالتين في واحدة الزمن هو الجداء $\langle i|j \rangle$ واحتمال الانتقال هو مربع هذه السعة نرمز له بـ W_{ij}

$$W_{ij} = \left|\langle i|j \rangle\right|^2 = W_{ji} \qquad (3)$$

ومن جهة أخرى فإن تغير $p_i(t)$ في واحدة الزمن هو الفرق بين ما ينتقل إلى هذه الحالة من مجموعة الحالات الأخرى المتاحة وبين ما ينتقل من هذه الحالة إلى الحالات الأخرى، أي أن

$$\frac{dp_i}{dt} = \sum_j p_j W_{ji} - \sum_j p_i W_{ij} = \sum_j W_{ij}\left(p_j - p_i\right) \qquad (4)$$

نأخذ هذه العلاقة بعين الاعتبار في اشتقاق (1)

$$\frac{dH}{dt} = \sum_i \left(\frac{dp_i}{dt} Lnp_i + \frac{dp_i}{dt}\right) = \sum_{i,j} W_{ij}\left(p_j - p_i\right)\left[Lnp_i + 1\right] \qquad (5)$$

يلعب الدليلان i و j دوراً متناظراً في هذه العلاقة؛ يمكن أن نكتبها نظراً لـ (3)

$$\frac{dH}{dt} = \sum_{i,j} W_{ij}\left(p_i - p_j\right)\left[Lnp_j + 1\right]$$

وبالتالي

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{1}{2}\sum_{i,j}\left(p_j - p_i\right)\left[Lnp_j - Lnp_i\right]$$

إن الجداء في كل حد من هذا المجموع موجب دوماً (≥ 0) لأن Ln دالة رتيبة متزايدة، ومنه

$$\frac{dH}{dt} \le 0$$

تقع المساواة من أجل $p_j = p_i$ أياً كان الزوجان i و j : تتناقص H مع الزمن إلى أن تصل إلى نهاية صغرى حيث تتساوى احتمالات الحالات المتاحة فيما بينها – وهو التعبير عن حالة التوازن الإحصائي حسب الفرضية الأولى في الميكانيك الإحصائي.

واضح أن $H = -S$ عندما تكون $\langle i|$ متجهة خاصة للطاقة $p_i = \rho(E_i)$: تزداد قيمة الأنتروبية إلى أن تبلغ قيمة عظمى ويحل التوازن الإحصائي.

لنختم هذه الفقرة بالعودة إلى العلاقة (1.6) التي تشير إلى استحالة وجود نظمة كمومية جهرية في حالة مستقرة : قيمة محددة للطاقة وذلك بتبيان مدى صغر المسافة الفاصلة بين مختلف مستويات الطاقة.

رمزنا بـ Γ لعدد الحالات المتاحة للنظمة في مجال طاقة منته $(E, E + \Delta E)$ وهكذا فالمسافة الفاصلة بين مستويي طاقة ولنرمز لها بـ $D(E)$ هي

$$D(E) = \frac{\Delta E}{\Gamma} = \Delta E e^{-S(E)}$$

وبما أن S جمعية فإن المسافة الوسطية بين مستويي طاقة لنظمة جهرية كمومية تتناقص بشكل أسي عندما ترتفع الأعداد الكمومية، وبشكل خاص عندما يرتفع عدد الجسيمات.

2. حساب مؤثر الكثافة

1.2- التوزع القانوني (جيبس) Gibbs

إن أبسط تعبير للعلاقة بين مؤثر الكثافة والطاقة هو عندما لا يتوقف المؤثر على الزمن وبالتالي ρ ثابتة و E ثابتة أيضاً والمجموعة الإحصائية مؤلفة من نظمات معزولة. وبالتالي فإن الاحتمال يساوي الصفر من أجل كل قيم الطاقة ماعدا القيمة الثابتة التي نرمز لها بـ E_0 وهذا هو تعريف دالة ديراك. نكتب إذاً

$$\rho(E) = c\delta(E - E_0) \qquad (2.1)$$

ونقول عن هذا التوزع إنه التوزع الميكروقانوني. لا يختلف هذا التعريف عن التعريف التقليدي حيث $\rho(p, q) = \rho(E)$ نقطة في فضاء الطور يحدد التوزع الميكروقانوني $E = E_0$ فيه فوق مستوي. إن ثبات E، أي النظر في نظمات المجموعة الإحصائية كنظمات معزولة يجعل من المستحيل دراسة مفاعيل ترجحات الطاقة الإحصائية؛ ولذا يفضل عندما نريد أخذ هذه الترجحات بعين الاعتبار النظر إلى النظمة الكمومية موضوع الدراسة، A، كجزء صغير من نظمة كمومية كبيرة معزولة A^* – مؤلفة من النظمة A ومن المستودع الحراري، المحم، A'، $A^* = A + A'$ – ذات طاقة ثابتة E^* تساوي عملياً طاقة المحم E' و $E << E'$. تتبادل النظمة A والمحم A' الطاقة ولم تعد طاقة A ثابتة كما في حال التوزع الميكروقانوني. يسمى هذا التوزع توزع جيبس القانوني. يصح التوزع الميكروقانوني على النظمة الكلية A^* ذات الطاقة الثابتة $E + E' = E^*$ ؛ E و E' متغيرتان. لدينا إذاً

$$\rho = C\delta(E + E' - E^*) \qquad (2.1)'$$

إن كثافة الاحتمال بدليل المتغير العشوائي E هي تعريفاً

$$dP = p(E)dE = \rho(E)\frac{d\phi}{dE}dE \qquad (2.2)$$

حيث $\frac{d\phi}{dE}$ هو عدد الحالات المتاحة في واحدة الطاقة : $\frac{d\Gamma}{dE} = \frac{\Gamma}{\Delta E}$، هذا عندما تتألف النظمة الكمومية من نوع واحد من الحالات المتاحة، أما عندما يكون لدينا n نوعاً فإن $\frac{d\phi}{dE}$ تتحول إلى

$$\prod_{i=1}^{n}\frac{d\phi_i}{dE_i}=\prod_{i=1}^{n}\frac{\Gamma_i}{\Delta E_i}=\prod_{i=1}^{n}\frac{d\Gamma_i}{dE_i}$$

نكتب إذاً من أجل النظمة الميكروقانونية A^* ونوعي الحالات المتاحة لـ A و A' (2.2) على الشكل

$$dP=\rho(E^*)\frac{d\phi}{dE}dE\frac{d\phi'}{dE'}dE'$$

$$dP=C\delta(E+E'-E^*)d\Gamma d\Gamma' \qquad (2.2)'$$

إن ما يهمنا هو طاقة النظمة A وليس طاقة النظمتين المساعدتين A^* و A'. نحصل بمكاملة $(2.2)'$ من أجل كل القيم المتاحة للطاقة E' على احتمال حصول النظمة A على الطاقة E_n شرط كون $E_n+E'=E^*$

$$P(E=E_n)=\int C\delta(E_n+E'-E^*)d\Gamma' \qquad (2.3)$$

هذا الاحتمال هو تعريفاً العنصر القطري $\rho_{nn}=\rho_n$ لمؤثر الكثافة.

نكتب في هذا التكامل العنصر التفاضلي $d\Gamma'$ بدليل الأنتروبية S' :

$$d\Gamma'=\frac{\Gamma'}{\Delta E'}dE'=\frac{e^{S'(E')}}{\Delta E'}dE'$$

ويعطي التكامل قيمة الدالة ρ_n من أجل $E'=E^*-E_n$

$$\rho_n=C\left.\frac{e^{S'(E')}}{\Delta E'}\right|_{E'=E^*-E_n} \qquad (2.4)$$

إن $E^* >> E_n$ بحيث يمكننا النظر إلى المجال $\Delta E'$ كمقدار ثابت لا يتأثر بالتغيرات الطفيفة التي تطرأ على E'، هذا من جهة؛ ننشر من جهة ثانية $S'(E')$ في جوار E^* مذكرين بتعريف درجة الحرارة – وهي درجة الحرارة المشتركة لكل أجزاء النظمة A^* –

$$S'(E')=S'(E^*-E_n)=S'(E^*)-E_n\left.\frac{\partial S'}{\partial E'}\right|_{E'=E^*}$$

$$=S'(E^*)-\frac{E_n}{T}$$

نجمع المقادير الثابتة C، $\Delta E'$ و $e^{S'(E^*)}$ في حد واحد ونكتب (2.4) على الشكل

$$\rho_{nn}=\frac{C}{\Delta E'}e^{S'(E^*)}e^{-\frac{E_n}{T}}=\alpha e^{-\frac{E_n}{T}} \qquad (2.5)$$

ونعين ثابتة التنظيم α انطلاقاً من العلاقة

$$Tr\rho=\sum_n\rho_n=\sum_n p_n=1=\alpha\sum_n e^{-\frac{E_n}{T}}$$

لنجد أن

$$\alpha=\frac{1}{\sum_n e^{-\frac{E_n}{T}}}=\frac{1}{Z}$$

$$Z=\sum_n e^{-\frac{E_n}{T}} \qquad (2.6)$$

يطلق على Z اسم دالة التجزئة (من الألمانية Zustandssumme جمع الحالات) قارن هذا التعريف الجمعي مع التعريف التكاملي لدالة التجزئة في الحالة التقليدية ((II.(3.(1.4)))

$$Z=\int e^{-\frac{E(p,q)}{T}}\,dpdq$$

2.2– دالة التجزئة وحساب القيم الوسطية

لنبدأ بالملاحظة التالية : لتكن $|\psi\rangle$ متجهة خاصة لمؤثر ما X تقابلها القيمة الخاصة x، $X|\psi\rangle = x|\psi\rangle$ ولتكن f دالة متصلة بالمؤثر X. إن $|\psi\rangle$ متجهة خاصة لـ $f(X)$ تقابلها القيمة الخاصة $f(x)$. يكفي تقريب $f(X)$ بكثير حدود $\sum_n \alpha_n X^n$ و $|\psi\rangle$ متجهة خاصة لـ X^n تقابلها القيمة الخاصة x^n، $\sum_n \alpha_n x^n$ تقريب لـ $f(x)$.

لتكن $|\psi\rangle$ متجهة خاصة للهاميلتوني H تقابلها القيمة الخاصة E، لدينا على وجه الخصوص من أجل الدالة الأسية e^H :

$$e^H = 1 + H + \frac{H^2}{2!} + \frac{H^3}{3!} + \dots$$

$$e^H|\psi\rangle = \left(1 + E + \frac{E^2}{2!} + \frac{E^3}{3!}\dots\right)|\psi\rangle = e^E|\psi\rangle$$

وإذا كانت القيم الخاصة هي E_{nn} القطرية فإن

$$\mathrm{Tr}\, e^H = \mathrm{Tr}\, e^{E_n}$$

ترينا هذه الملاحظة أنه يمكننا كتابة دالة التجزئة الكمومية على الشكل

$$Z=\sum_n e^{-\frac{E_n}{T}} = \mathrm{Tr}\, e^{-\frac{H}{T}} \qquad (2.6)'$$

نطبق نفس الملاحظة على $\alpha = \frac{1}{Z}$ في (2.5)

$$\rho_n = \frac{e^{-\frac{E_n}{T}}}{Z} \qquad (2.5)'$$

و

$$\rho = \frac{e^{-\frac{H}{T}}}{\mathrm{Tr}\, e^{-\frac{H}{T}}} \qquad (2.7)$$

هذه هي العلاقة الأساسية المعبرة عن مؤثر الكثافة في كل الفيزياء الإحصائية ويمكن النظر إليها كموضوعة الفيزياء الإحصائية.

تسمح لنا دالة التجزئة بحساب القيم الوسطية لمختلف المؤثرات :

$$\langle A \rangle = \mathrm{Tr}\,\rho A = \sum_n \rho_n A_{nn} = \frac{\sum_n e^{-\frac{E_n}{T}} A_{nn}}{Z}$$

لدينا على سبيل المثال طاقة النظمة الميكانيكية الجهرية – طاقتها الوسطية :

$$\langle H \rangle = \langle E \rangle = \frac{\sum_n E_n e^{-\frac{E_n}{T}}}{Z} = -\frac{\frac{\partial Z}{\partial \beta}}{Z} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \mathrm{Ln}Z \qquad (2.8)$$

حيث وضعنا $\beta = \frac{1}{T}$ [3] والصورة ليست سوى مشتق المخرج Z بالنسبة لـ β مع إشارة ناقص.

لا نريد هنا تكرار الحسابات التي أجريناها على دالة التجزئة التقليدية في الفصل الثالث من المجلد الثاني والتي تبقى صحيحة في الحالة الكمومية على غرار حساب الطاقة في (2.8) ولكننا نستعيد النتائج التي وصلنا إليها. وهكذا فإن

$$\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \equiv \langle (\Delta E)^2 \rangle = \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \mathrm{Ln}Z \qquad (2.9)$$

الذي يبين بأخذ (2.8) بعين الاعتبار أن

$$\frac{\partial E}{\partial \beta} \le 0$$

وبالتالي

$$\frac{\partial E}{\partial T} \ge 0$$

والطاقة دالة متزايدة بدرجة الحرارة.

وكذلك فإن الأنتروبية معطاة بـ (((1.12).3).II)

$$S = \mathrm{Ln}Z + \beta E \qquad (2.10)$$

والطاقة الحرة لهيلمهولتز بالعلاقة التي تليها

$$F = E - TS = -T\mathrm{Ln}Z \qquad (2.11)$$

يمكن طبعاً أن نحصل على الطاقة الحرة مباشرة من تعريف S في (1.22) الذي يعطينا (2.10)

$$S = -\sum_n \rho_n \mathrm{Ln}\rho_n$$

لكن $\rho_n = \frac{e^{-\frac{E_n}{T}}}{Z}$، أي أن

---

[3] إنها ناقص β المعرفة في (1.3).

$$S = -\sum_n \frac{e^{-\frac{E_n}{T}}}{Z} \times \left(-\frac{E_n}{T} - LnZ\right)$$
$$= \frac{E}{T} + LnZ$$

وضعنا $E \equiv \langle E \rangle$ الطاقة الترموديناميكية ولاحظنا أن $\sum_n \rho_n = \sum_n \frac{e^{-\frac{E_n}{T}}}{Z} = 1$ ؛ ومنه العلاقة (2.11) مكتوبة على الشكل التالي

$$LnZ = -\frac{F}{T}$$
$$\frac{1}{Z} = e^{\frac{F}{T}}$$

و
$$\rho_n = e^{\frac{F - E_n}{T}} \qquad (2.12)$$

ولدينا في التقريب شبه التقليدي

$$\rho = \frac{1}{(2\pi\hbar)^s} e^{\frac{F - E(p,q)}{T}} \qquad (2.13)$$

لنحسب تفاضل الطاقة الحرة انطلاقاً من (2.12) بفرض كون الطاقة تابعة بالإضافة إلى تبعيتها لدرجة الحرارة إلى عدد من الوسطاء الخارجية – الحجم والحقول الخارجية على سبيل المثال – نرمز لها بـ $\lambda = \lambda_1, \lambda_2 ...$. لدينا من علاقة التنظيم

$$\sum_n \rho_n = 1$$

$$0 = \sum_n d\rho_n = \sum_n \rho_n \left[\frac{1}{T}\left(dF - \frac{\partial E_n}{\partial \lambda} d\lambda\right) - \frac{1}{T^2}(F - E_n) dT\right]$$

نكتبها على الشكل

$$dF \sum_n \rho_n = d\lambda \sum_n \rho_n \frac{\partial E_n}{\partial \lambda} + \frac{dT}{T}\left(F \sum_n \rho_n - \sum_n \rho_n E_n\right)$$

لكن $\sum_n \rho_n = 1$ ، $\sum_n \rho_n E_n = \langle E \rangle$ ، $\frac{\partial \langle E_n \rangle}{\partial \lambda} = \sum_n \rho_n \frac{\partial E_n}{\partial \lambda}$ و $F - \langle E \rangle = -TS$ ، ولذا فإن

$$dF = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \lambda} d\lambda - SdT \qquad (2.14)$$

لنلاحظ أخيراً من كون $E_n = H_{nn}$ حيث H_{nn} العنصر القطري للهاميلتوني أن

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \left(\frac{\partial H}{\partial \lambda}\right)_{nn}$$

وبالجمع بعد ضرب كل حد بـ ρ_n

$$\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \lambda} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right\rangle$$

وأخيراً

$$dF = -SdT + \left\langle \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right\rangle d\lambda \qquad (2.14)'$$

وهذا هو الشكل العام لتفاضل الطاقة الحرة F.

لنبين أخيراً أن المبدأ الثاني في الترموديناميك المعطى على الشكل $dS = \frac{dQ}{T}$ محقق في الإحصاء الكمومي.

إن القوة الوسطية المطبقة على نظمة جهرية نتيجة تغير الوسيط الخارجي هي تعريفاً

$$\langle F_\lambda \rangle = -\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \lambda} = -\frac{1}{Z}\sum_n e^{-\beta E_n} \frac{\partial E_n}{\partial \lambda}$$

$$= +\frac{1}{Z}\frac{1}{\beta}\frac{\partial Z}{\partial \lambda} = \frac{1}{\beta}\frac{\partial LnZ}{\partial \lambda} \qquad (2.15)$$

وعندما تكون الوسطاء الخارجية هي الحجم فإن القوة الوسطية هي الضغط المساوي لـ

$$\langle p \rangle = \frac{1}{\beta}\frac{\partial LnZ}{\partial V} \qquad (2.15)'$$

لنكتب في حساب تفاضل S في (2.10) $Z = Z(\lambda, \beta)$؛ لدينا

$$dS = \frac{\partial LnZ}{\partial \lambda} d\lambda + \frac{\partial LnZ}{\partial \beta} d\beta + E d\beta + \beta dE$$

ونظراً لـ (2.15) و (2.8)

$$dS = \beta \langle F_\lambda \rangle d\lambda - E d\beta + E d\beta + \beta dE$$

إن $\langle F_\lambda \rangle d\lambda$ هو عمل النظمة dW (لنتذكر أن $\langle p \rangle dV$ هو عمل النظمة $dV > 0$)، و $dE = -dW + dQ$، ومنه

$$TdS = dW - dW + dQ$$

و

$$dS = \frac{dQ}{T}$$

وهو المطلوب.

لنلاحظ في النهاية أن دالة التجزئة للنظمة A^* المؤلفة من نظمتين غير متفاعلتين A و A' هي جداء دالتي التجزئة لهاتين النظمتين. لنفرض أن الطاقات المتاحة للجملة A هي E_i وتلك المتاحة لـ A' هي E'_k والطاقة المتاحة لـ A^* من أجل i و k معينتين هي $E_i + E'_k$ حيث نهمل التفاعل بين النظمتين.

لدينا

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i}$$

$$Z' = \sum_k e^{-\beta E'_k}$$

وأخيراً

$$dF = -SdT + \left\langle \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right\rangle d\lambda \qquad (2.14)'$$

وهذا هو الشكل العام لتفاضل الطاقة الحرة F .

لنبين أخيراً أن المبدأ الثاني في الترموديناميك المعطى على الشكل $dS = \frac{dQ}{T}$ محقق في الإحصاء الكمومي.

إن القوة الوسطية المطبقة على نظمة جهرية نتيجة تغير الوسيط الخارجي هي تعريفاً

$$\langle F_\lambda \rangle = -\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \lambda} = -\frac{1}{Z}\sum_n e^{-\beta E_n}\frac{\partial E_n}{\partial \lambda}$$
$$= +\frac{1}{Z}\frac{1}{\beta}\frac{\partial Z}{\partial \lambda} = \frac{1}{\beta}\frac{\partial LnZ}{\partial \lambda} \qquad (2.15)$$

وعندما تكون الوسطاء الخارجية هي الحجم فإن القوة الوسطية هي الضغط المساوي لـ

$$\langle p \rangle = \frac{1}{\beta}\frac{\partial LnZ}{\partial V} \qquad (2.15)'$$

لنكتب في حساب تفاضل S في (2.10) $Z = Z(\lambda, \beta)$ ؛ لدينا

$$dS = \frac{\partial LnZ}{\partial \lambda}d\lambda + \frac{\partial LnZ}{\partial \beta}d\beta + Ed\beta + \beta dE$$

ونظراً لـ (2.15) و (2.8)

$$dS = \beta\langle F_\lambda \rangle d\lambda - Ed\beta + Ed\beta + \beta dE$$

إن $\langle F_\lambda \rangle d\lambda$ هو عمل النظمة dW (لنتذكر أن $\langle p \rangle dV$ هو عمل النظمة $dV > 0$)،

و $dE = -dW + dQ$ ، ومنه

$$TdS = dW - dW + dQ$$

و

$$dS = \frac{dQ}{T}$$

وهو المطلوب.

لنلاحظ في النهاية أن دالة التجزئة للنظمة A^* المؤلفة من نظمتين غير متفاعلتين A و A' هي جداء دالتي التجزئة لهاتين النظمتين. لنفرض أن الطاقات المتاحة للجملة A هي E_i وتلك المتاحة لـ A' هي E'_k والطاقة المتاحة لـ A^* من أجل i و k معينتين هي $E_i + E'_k$ حيث نهمل التفاعل بين النظمتين.

لدينا

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i}$$
$$Z' = \sum_k e^{-\beta E'_k}$$

و

$$Z^* = \sum_{i,k} e^{-\beta(E_i + E'_k)} = ZZ'$$

وهذا ما يضمن جمعية الأنتروبية المعرفة في (2.10)

$$S^* = LnZ^* + \beta E^* = LnZ + LnZ' + \beta E + \beta E' \qquad (2.16)$$

حيث E، E' و E^* هي بالترتيب الطاقات الوسطية لـ A، A' و A^*

$$S^* = S + S'$$

3.2- تعريف الأنتروبية الكمومية ونظرية الإعلام

إن عدد الحالات المتاحة لنظمة مؤلفة من N جسيماً، وبصورة أعم من مجموعة N من النظمات المختلفة، حيث n_1 منها في حالة متطابقة تتميز بالطاقة E_1 و n_2 في حالة متطابقة تتميز بالطاقة E_2،... و n_m في حالة متطابقة تتميز بالطاقة E_m، هو

$$\Gamma = \frac{N!}{n_1!n_2!...n_m!} \qquad (1)$$

و

$$Ln\Gamma = LnN! - \sum_{i=1}^{m} Lnn_i!$$

نحسب اللوغارتيم بتقريب ستيرلينغ

$$LnN! = Ln1 + Ln2 + ... LnN \simeq \int_1^N Lnxdx$$

إن التابع الأصلي لـ Lnx هو $xLnx - x$

$$= \left[xLnx - x\right]_1^N \simeq NLnN - N$$

حيث أهملنا 1 أمام N. لدينا إذاً

$$Ln\Gamma = NLnN - N - \sum_{i=1}^{m} n_i Lnn_i - n_i \qquad (2)$$

نفتش عن نهاية عظمى لـ $S = Ln\Gamma$ مقيدة بشرطين هما

$$\sum_{i=1}^{m} n_i = N$$

$$\sum_{i=1}^{m} n_i E_i = E$$

ونحتاج بالتالي إلى مضروبي لاغرانج، نرمز لهما بـ α و β. إن N ثابتة والمتغيرات هي n_i

$$dLn\Gamma = -\sum_{i=1}^{m} dn_i\left(Lnn_i + \alpha + \beta E_i\right) = 0.$$

ومنه قيم n_i المقابلة للنهاية العظمى

$$Lnn_i = -\alpha - \beta E_i \qquad (3)$$

$$n_i = e^{-\alpha - \beta E_i}$$

إن $e^{-\alpha}$ ثابتة تنظيم يحددها الشرط $\sum n_i = N$

$$N = e^{-\alpha}\sum_{i=1}^{m} e^{-\beta E_i} = e^{-\alpha} Z \qquad (4)$$

إن احتمال وجود الجسيمات (النظمات المختلفة) في الحالة n_i هو

$$p_i = \frac{n_i}{N} = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} \qquad (5)$$

لنجد من جديد العلاقة (2.5).

لنعد إلى (2) آخذين (5) بعين الاعتبار

$$L n\Gamma = NLnN - \sum_{i=1}^{m} Np_i LnNp_i$$

$$L n\Gamma = -N\sum_{i=1}^{m} p_i Lnp_i = (n_1 s_1 + n_2 s_2 + \ldots + n_m s_m) \qquad (6)$$

التي تعيدنا إلى تعريف الأنتروبية الكمومية الذي حصلنا عليه في (1.22) بتطبيق مبدأ المقابلة مع التعريف التقليدي

$$L n\Gamma = S \qquad (2.17)$$

حيث رمزنا لـ $n_1 s_1 + \ldots + n_m s_m$ بـ S.

إن أهمية هذه العلاقة هي في تبيانها أن ارتفاع قيمة $Ln\Gamma$ يمثل ارتفاع عدد الحالات المتاحة وبالتالي تعاظم العشوائية التي تعني بدورها نقص المعلومات عن توزع النظمات على مختلف الحالات المتاحة. إن S أعظمية يعني الفوضى الأعظمية واللاترتيب. وهكذا فإنه من الممكن القول أن للرسائل – للمعلومات التي تحتويها – أنتروبية؛ إلا أنها، خلافاً للأنتروبية التي رأيناها والتي تقيس الفوضى وفقدان التنظيم، تقيس عبر الإعلام الذي تزودنا به التنظيم. نقيس الإعلام الذي تحمله الرسالة على أنه أنتروبيتها السالبة[4]، فالمعلومة (الخبر اليقين) عن الحالة المتاحة i، على سبيل المثال، تحول احتمال هذه الحالة من p_i إلى 1 وتعدم بالتالي الحد $-p_i Lnp_i$ في أنتروبية النظمة الترموديناميكية؛ أي أنها تضيف بذلك الحد $p_i Lnp_i$ إلى الأنتروبية ولكنها لا تضيف شيئاً إذا كان احتمال الحالة i يقيناً أصلاً : $-Ln\Gamma \leq 0$، (لا ننسى أن $Lnp_i < 0$ و $Ln\Gamma \geq 0$)، وكلما كان الإعلام الذي تحمله الرسالة ضئيلاً كانت الرسالة أكثر احتمالاً. فعلى سبيل المثال لا تحوي التوافه، الصيغ المبتذلة، وتحصيل الحاصل على إعلام مفيد خلافاً للقصائد الكبرى، كما يقول فينر Wiener أحد مؤسسي نظرية الإعلام (Information Theory) في The Human Use of Human Beings (1950). إن أكبر مقدار يمكن إضافته للأنتروبية عن الحالة

---

[4] انظر على سبيل المثال « Science and Information Theory » ،L. Brillouin الطبعة الثانية Academic Press N.Y (1962).

المتاحة i هو $\frac{1}{2}\mathrm{Ln}\frac{1}{2}$ وأنتروبية الإعلام متناقصة، وتصل إلى القيمة 0 عندما تصبح كل الحالات المتاحة يقينية.

وهكذا فإن الأنتروبية في نظرية الإعلام، التي أسهمت الفيزياء الإحصائية في إنشاءها، أنتروبية سالبة ومتناقصة تنقل من العشوائية إلى النظام والترتيب. إن منشأ الترتيب في الكائنات الحية على سبيل المثال هو المعلومات المتكدسة في رموزها الجينية.

3. تطبيقات

1.3– المغنطيسية المسايرة

ليكن $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ العزم الزاوي الكلي لذرة الغاز، $\vec{L}$ عزمها الزاوي المداري و $\vec{S}$ عزمها السبيني (الصميمي)، عزمها المغنطيسي هو

$$\vec{M} = g\mu\vec{J} \qquad (3.1)$$

حيث μ وحدة قياس العزم المغنطيسي (المساوية بصورة عامة لمغناتون بور $\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e}$، e و m_e شحنة وكتلة الإلكترون) و g معامل لاندي المعطى بالعلاقة (((IV.(4.(2.29)

$$g = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}$$

يأخذ مسقط $\vec{J}$ على محور ما Oz، يعينه اتجاه الحقل المغنطيسي المطبق $\vec{B}$، $2J+1$ قيمة هي $-J, -J+1, ..., J-1, J$ وهكذا فإن لطاقة التفاعل بين الحقل $\vec{B}$ والعزم المغنطيسي $\vec{M}$، $E = -\vec{M}\cdot\vec{B}$، $2J+1$ قيمة ممكنة : $2J+1$ مستوى طاقة هي $-g\mu J_z B$ ودالة التجزئة للذرة هي

$$Z = \sum_{J_z=-J}^{+J} e^{\beta g\mu J_z B} \qquad (3.2)$$

والقيمة الوسطية لمسقط العزم المغنطيسي على Oz

$$\langle M_z \rangle = g\mu\langle J_z \rangle = \frac{\sum_{J_z=-J}^{J} g\mu J_z e^{\beta g\mu J_z B}}{\sum e^{\beta g\mu J_z B}} = \frac{1}{\beta}\frac{\partial \mathrm{Ln}Z}{\partial B} \qquad (3.3)$$

لنحسب أولاً Z بوضع

$$\eta = \beta g\mu B \qquad (3.4)$$

$$Z=\sum_{J_z=-J}^{J} e^{\eta J_z}=e^{-\eta J}+e^{-\eta(J-1)}+\ldots+e^{\eta J} \qquad (3.2)'$$

الطرف الثاني سلسلة هندسية منتهية نكتبها على الشكل

$$e^{-\eta J}\left(1+e^{\eta}+\ldots+e^{2J\eta}\right)=e^{-\eta J}\left(\frac{1}{1-e^{\eta}}-\frac{e^{(2J+1)\eta}}{1-e^{\eta}}\right)$$

نظراً لأن

$$1+x+\ldots+x^{2J}=\frac{1}{1-x}-\frac{x^{2J+1}}{1-x}$$

ومنه

$$Z=\frac{e^{-\eta J}-e^{(J+1)\eta}}{1-e^{\eta}}$$

نضرب الصورة والمخرج بـ $e^{-\eta/2}$ لإعطائها شكلاً متناظراً

$$Z=\frac{e^{-\eta\left(J+\frac{1}{2}\right)}-e^{\eta\left(J+\frac{1}{2}\right)}}{e^{-\eta/2}-e^{\eta/2}}=\frac{\operatorname{sh}\left(J+\frac{1}{2}\right)\eta}{\operatorname{sh}\eta/2} \qquad (3.2)''$$

$$\operatorname{Ln}Z=\operatorname{Ln}\operatorname{sh}\left(J+\frac{1}{2}\right)\eta-\operatorname{Ln}\operatorname{sh}\frac{\eta}{2} \qquad (3.5)$$

نكتب $\frac{\partial}{\partial B}=\frac{\partial}{\partial\eta}\beta g\mu$ ؛ $\frac{\partial \operatorname{Ln}X\left(y(u)\right)}{\partial u}=\frac{1}{X}\frac{\partial X}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial u}$

وهكذا فإن مشتق (3.5) بالنسبة لـ B هو

$$\frac{d\operatorname{Ln}Z}{dB}=\left[\frac{\left(J+\frac{1}{2}\right)\operatorname{ch}\left(J+\frac{1}{2}\right)\eta}{\operatorname{sh}\left(J+\frac{1}{2}\right)\eta}-\frac{\frac{1}{2}\operatorname{ch}\frac{1}{2}\eta}{\operatorname{sh}\frac{1}{2}\eta}\right]\beta g\mu$$

ومنه حسب (3.3)

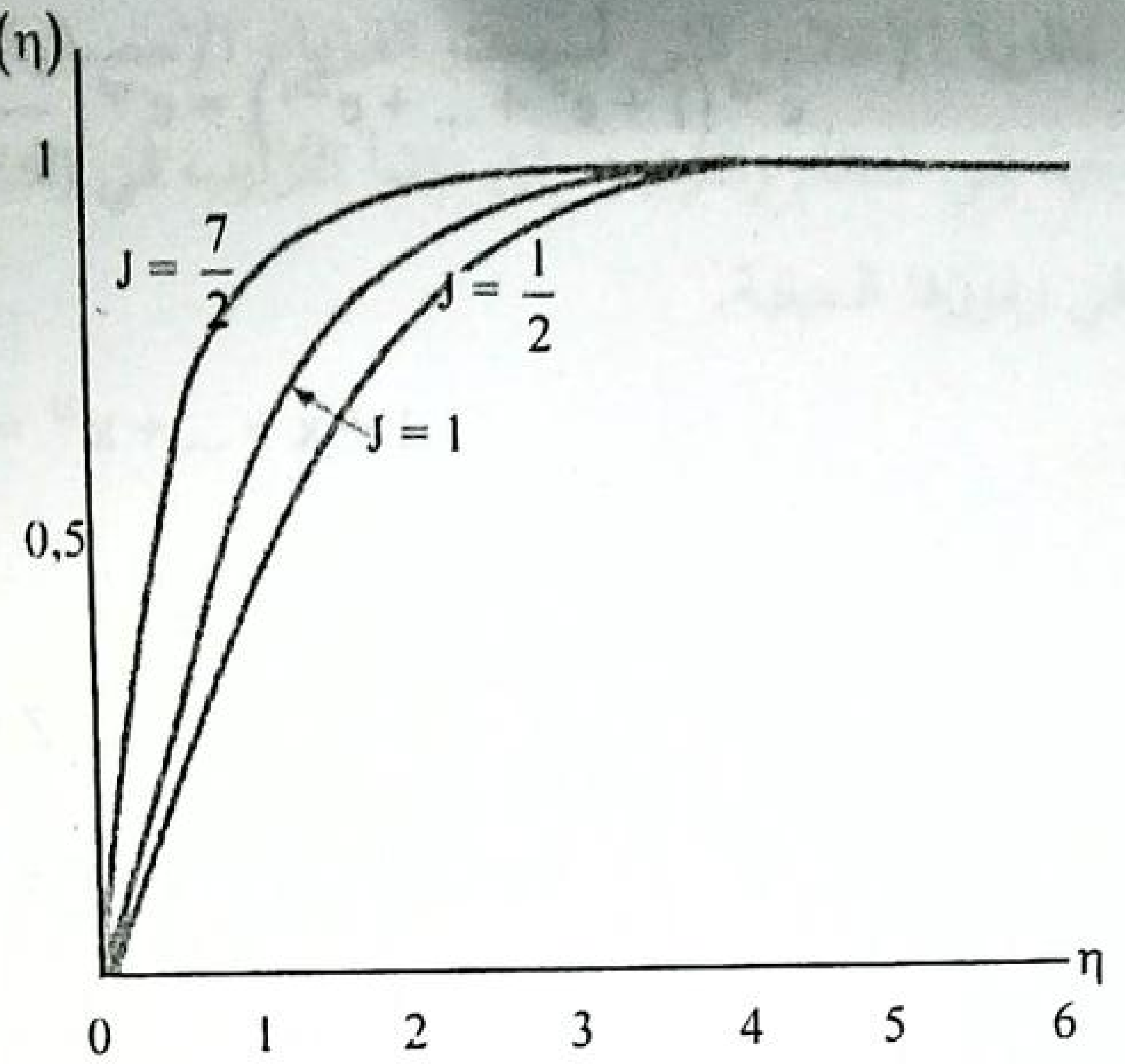
$$\langle M_z\rangle=\left[\frac{\left(J+\frac{1}{2}\right)\operatorname{ch}\left(J+\frac{1}{2}\right)\eta}{\operatorname{sh}\left(J+\frac{1}{2}\right)\eta}-\frac{\frac{1}{2}\operatorname{ch}\frac{1}{2}\eta}{\operatorname{sh}\frac{1}{2}\eta}\right]g\mu \qquad (3.6)$$

وتكتب عادة على الشكل

$$\langle M_z\rangle=g\mu J\,\mathscr{B}_J(\eta) \qquad (3.7)$$

حيث نرمز بـ $\mathscr{B}$ لدالة بريللوان (Brillouin) من أجل العزم المغنطيسي J، الشكل.1

$$\mathscr{B}(\eta) = \frac{1}{J}\left[\left(J+\frac{1}{2}\right)\coth\left(J+\frac{1}{2}\right)\eta - \frac{1}{2}\coth\frac{1}{2}\eta\right] \qquad (3.8)$$



الشكل.1

لنميز حالتين :

1− إن $\coth x = 1$ من أجل $x \gg 1$ $(e^{-x} \ll e^{x})$، أي من أجل $\eta \gg 1$ هنا التي تعني حسب (3.4) أن $T = \frac{1}{\beta}$ صغيرة جداً و $\mathscr{B} = 1$ وبالتالي

$$\langle M_Z \rangle = g\mu J$$

العزم المغنطيسي ثابت، مستقل عن درجة الحرارة وعن الحقل المغنطيسي : تجمدت العزوم المغنطيسية في اتجاه واحد $J_Z = J$.

2− أما من أجل $x \ll 1$ فمن الممكن نشر $\coth x$ على النحو التالي، مكتفين بالحدود من الدرجة الثانية

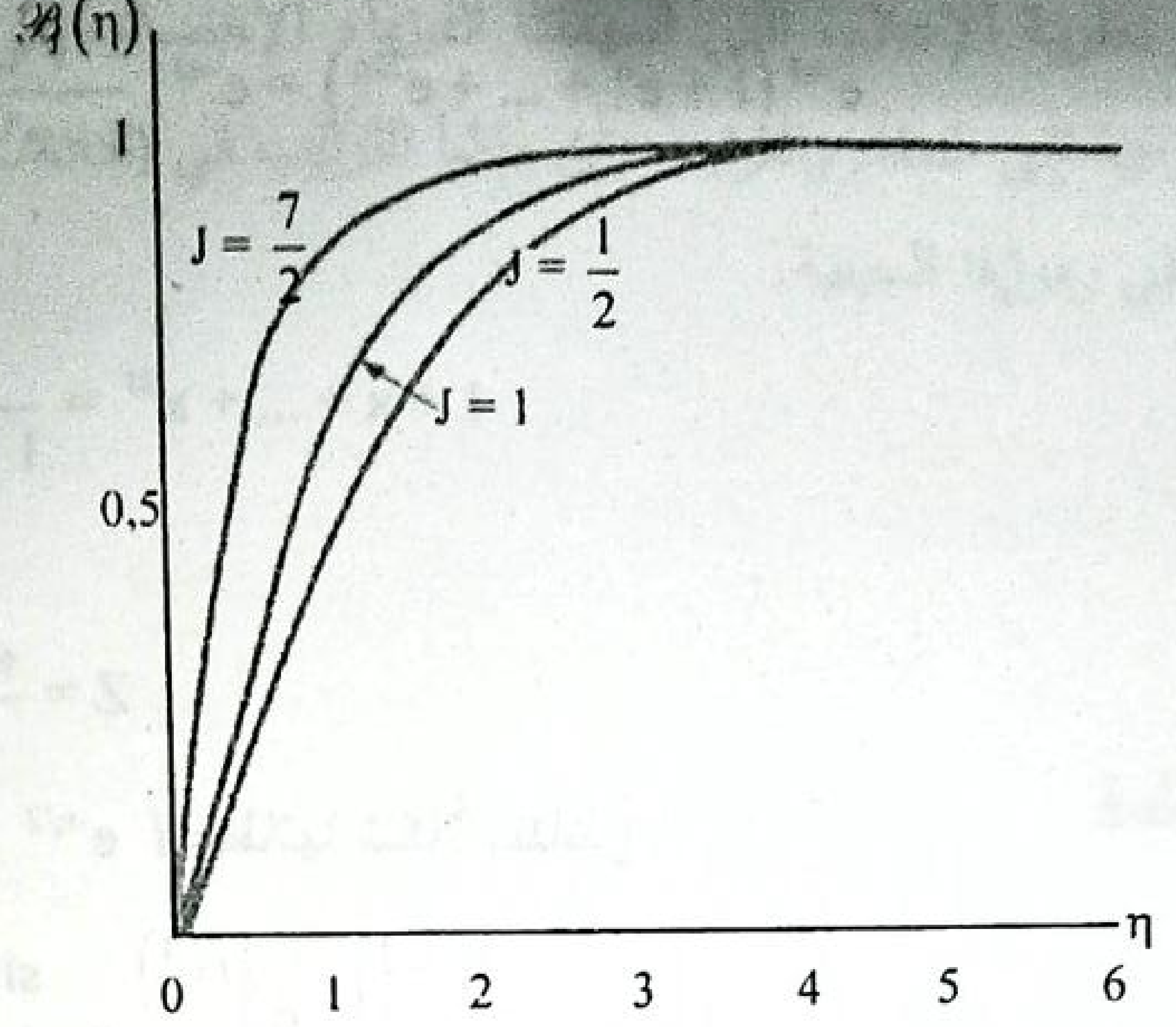
$$\coth x = \frac{e^{x}+e^{-x}}{e^{x}-e^{-x}} = \frac{\left(1+x+\frac{x^2}{2!}+\frac{x^3}{3!}\dots\right)+\left(1-x+\frac{x^2}{2!}-\frac{x^3}{3!}\dots\right)}{\left(1+x+\frac{x^2}{2!}+\frac{x^3}{3!}\dots\right)-\left(1-x+\frac{x^2}{2!}-\frac{x^3}{3!}\dots\right)}$$

$$= \frac{2\left(1+\frac{x^2}{2}\right)}{2\left(x+\frac{x^3}{3!}\right)} = \frac{1+\frac{x^2}{2}}{x\left(1+\frac{x^2}{6}\right)} = \frac{1}{x}\left(1+\frac{x^2}{2}\right)\left(1-\frac{x^2}{6}\right)$$

$$= \frac{1}{x}\left(1+\frac{x^2}{3}\right)$$

حيث نرمز بـ $\mathcal{B}$ لدالة بريللوان (Brillouin) من أجل العزم المغنطيسي J، الشكل.1

$$\mathcal{B}(\eta) = \frac{1}{J}\left[\left(J + \frac{1}{2}\right)\coth\left(J + \frac{1}{2}\right)\eta - \frac{1}{2}\coth\frac{1}{2}\eta\right] \quad (3.8)$$



الشكل.1

لنميز حالتين :

1– إن $\coth x = 1$ من أجل $x >> 1$ $(e^{-x} << e^{x})$، أي من أجل $\eta >> 1$ هنا التي تعني حسب (3.4) أن $T = \frac{1}{\beta}$ صغيرة جداً و $\mathcal{B} = 1$ وبالتالي

$$\langle M_Z \rangle = g\mu J$$

العزم المغنطيسي ثابت، مستقل عن درجة الحرارة وعن الحقل المغنطيسي : تجمدت العزوم المغنطيسية في اتجاه واحد $J_Z = J$.

2– أما من أجل $x << 1$ فمن الممكن نشر $\coth x$ على النحو التالي، مكتفين بالحدود من الدرجة الثانية

$$\coth x = \frac{e^{x} + e^{-x}}{e^{x} - e^{-x}} = \frac{\left(1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!}...\right) + \left(1 - x + \frac{x^2}{2!} - \frac{x^3}{3!}...\right)}{\left(1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!}...\right) - \left(1 - x + \frac{x^2}{2!} - \frac{x^3}{3!}...\right)}$$

$$= \frac{2\left(1 + \frac{x^2}{2}\right)}{2\left(x + \frac{x^3}{3!}\right)} = \frac{1 + \frac{x^2}{2}}{x\left(1 + \frac{x^2}{6}\right)} = \frac{1}{x}\left(1 + \frac{x^2}{2}\right)\left(1 - \frac{x^2}{6}\right)$$

$$= \frac{1}{x}\left(1 + \frac{x^2}{3}\right)$$

حيث نشرنا : $\left(1+\frac{x^2}{6}\right)^{-1} = 1 - \frac{x^2}{6}$ وأهملنا الحدود من الدرجة الرابعة بـ x .

وهكذا فإن x الصغيرة أمام الواحد تعطينا

$$\coth x = \frac{1}{x} + \frac{x}{3}$$

ومنه $\mathcal{B}(\eta)$ في هذه الحالة حسب (3.8) هي

$$\mathcal{B}(\eta) = \frac{1}{J}\left\{\left(J+\frac{1}{2}\right)\left[\frac{1}{\left(J+\frac{1}{2}\right)\eta} + \frac{1}{3}\left(J+\frac{1}{2}\right)\eta\right] - \frac{1}{2}\left(\frac{2}{\eta}+\frac{\eta}{6}\right)\right\}$$

وبحساب بسيط

$$= \frac{(J+1)}{3}\eta$$

ولدينا من (3.7) و (3.4)

$$\langle M_Z\rangle = g\mu\frac{J(J+1)}{3}\eta = \frac{g^2\mu^2 J(J+1)}{3T}B \qquad (3.9)$$

هذا من أجل ذرة واحدة؛ ومن أجل n ذرة في واحدة الحجوم فإننا نعرف القابلية المغنطيسية بالعلاقة

$$\chi = \frac{\partial n\langle M_Z\rangle}{\partial B}$$

وتساوي من أجل $\eta << 1$ التي تعني أن درجة الحرارة مرتفعة :

$$\chi = \frac{ng^2\mu^2 J(J+1)}{3T} \qquad (3.10)$$

والقابلية المغنطيسية متناسبة مع $\frac{1}{T}$ وهو ما يعرف باسم قانون كوري Curie. لدينا في الحالة الخاصة عندما يكون للذرة سبين $\frac{1}{2}$ فقط $J=\frac{1}{2}$: تقتصر دالة التجزئة على حدين $J=\frac{1}{2}$ ، $g=2$ و $M_Z = \pm\mu$

$$\langle M_Z\rangle = \frac{\mu\left(e^{\beta\mu B} - e^{-\beta\mu B}\right)}{e^{\beta\mu B} + e^{\beta\mu B}} = \mu\, \text{th}\beta\mu B$$

والحالتان المتميزتان هما كما أعلاه $\text{th}x = 1$ من أجل $x >> 1$ ، أي من أجل $T = \frac{1}{\beta}$ صغيرة جداً والعزم المغنطيسي مجمد في اتجاه واحد – نحو الأعلى؛ ومن أجل درجات الحرارة المرتفعة فيصبح كما في

$$\left[J=\frac{1}{2} \text{ و } g=2\right](3.9)$$

$$\langle M_Z\rangle = \frac{\mu^2 B}{T}$$

حيث نشرنا : $\left(1+\frac{x^2}{6}\right)^{-1} = 1 - \frac{x^2}{6}$ وأهملنا الحدود من الدرجة الرابعة بـ x.

وهكذا فإن x الصغيرة أمام الواحد تعطينا

$$\coth x = \frac{1}{x} + \frac{x}{3}$$

ومنه $\mathcal{B}(\eta)$ في هذه الحالة حسب (3.8) هي

$$\mathcal{B}(\eta) = \frac{1}{J}\left\{\left(J+\frac{1}{2}\right)\left[\frac{1}{\left(J+\frac{1}{2}\right)\eta} + \frac{1}{3}\left(J+\frac{1}{2}\right)\eta\right] - \frac{1}{2}\left(\frac{2}{\eta} + \frac{\eta}{6}\right)\right\}$$

وبحساب بسيط

$$= \frac{(J+1)}{3}\eta$$

ولدينا من (3.7) و (3.4)

$$\langle M_z \rangle = g\mu \frac{J(J+1)}{3}\eta = \frac{g^2\mu^2 J(J+1)}{3T}B \qquad (3.9)$$

هذا من أجل ذرة واحدة؛ ومن أجل n ذرة في واحدة الحجوم فإننا نعرف القابلية المغنطيسية بالعلاقة

$$\chi = \frac{\partial n\langle M_z \rangle}{\partial B}$$

وتساوي من أجل $\eta << 1$ التي تعني أن درجة الحرارة مرتفعة :

$$\chi = \frac{ng^2\mu^2 J(J+1)}{3T} \qquad (3.10)$$

والقابلية المغنطيسية متناسبة مع $\frac{1}{T}$ وهو ما يعرف باسم قانون كوري Curie. لدينا في الحالة الخاصة عندما يكون للذرة سبين $\frac{1}{2}$ فقط $J = \frac{1}{2}$: تقتصر دالة التجزئة على حدين $J = \frac{1}{2}$، $g = 2$ و $M_z = \pm\mu$

$$\langle M_z \rangle = \frac{\mu\left(e^{\beta\mu B} - e^{-\beta\mu B}\right)}{e^{\beta\mu B} + e^{\beta\mu B}} = \mu\, \text{th}\beta\mu B$$

والحالتان المتميزتان هما كما أعلاه $\text{th}x = 1$ من أجل $x >> 1$، أي من أجل $T = \frac{1}{\beta}$ صغيرة جداً والعزم المغنطيسي مجمد في اتجاه واحد – نحو الأعلى؛ ومن أجل درجات الحرارة المرتفعة فيصبح كما في $[J = \frac{1}{2}$ و $g = 2](3.9)$

$$\langle M_z \rangle = \frac{\mu^2 B}{T}$$

3.3- الهزاز التوافقي الخطي

إن دالة التجزئة لهزاز توافقي خطي تواتره ω وطاقته $\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$ من أجل عدد كمومي ما n، $n = 0, 1, ...$ هي

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\hbar\omega}{T}\left(n+\frac{1}{2}\right)} = \frac{e^{-\frac{\hbar\omega}{2T}}}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{T}}} \qquad (3.13)$$

لأن $1 + x + ... + x^n + ... = \frac{1}{1 - x}$

وطاقته الوسطية هي

$$\langle E\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}LnZ = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{T}} - 1} \qquad (3.14)$$

نكتب الطرف الأخير في (3.13) بضرب الصورة والمخرج بـ $e^{\frac{\hbar\omega}{2T}}$ على الشكل

$$Z = \frac{1}{2sh\frac{\hbar\omega}{2T}} \qquad (3.13)'$$

ليكن لدينا نظمة مؤلفة من $N = n_1 + n_2 + ... + n_m$ هزازاً توافقياً خطياً تواترها ω_1، ω_2، ...، ω_m. إن دالة تجزئة هذه النظمة هي

$$Z_N = \prod_{i=1}^{m} n_i Z_i \qquad (3.15)$$

حيث كل واحدة من الدالات Z_i معطاة بـ (3.13). تأخذ Z_N في الحالة الخاصة التي تتألف النظمة فيها من m هزازاً توافقياً تواترها ω_1، ... ω_m ($n_i = 1$ من أجل $i = 1, ... m$) الشكل

$$Z_m = \prod_{i=1}^{m} Z_i = \prod_{i=1}^{m} \frac{e^{-\frac{\hbar\omega_i}{2T}}}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega_i}{T}}} = \prod_{i=1}^{m} \frac{1}{2sh\frac{\hbar\omega_i}{2T}} \qquad (3.16)$$

حيث كتبنا Z_i على الشكل '(3.13)؛ والطاقة الوسطية هي مجموع m طاقة وسطية من الشكل (3.14)

$$\langle E\rangle = \sum_{i=1}^{m}\langle E_i\rangle = \sum_{i} \frac{\hbar\omega_i}{2} + \frac{\hbar\omega_i}{e^{\frac{\hbar\omega_i}{T}} - 1} \qquad (3.17)$$

يطلق على $\frac{\hbar\omega_i}{2}$ اسم طاقة القاع للهزاز i؛ تأخذ طاقة القاع من أجل عدد لاعدود من الهزازات (الحقل الكهرطيسي على سبيل المثال) قيمة لا متناهية وتعبر عن ترجح الخواء في نظرية الحقول المكممة. لذا سنعتبرها مبدأ لقياس الطاقة هنا ونكتب بالتالي Z_m على الشكل

$$Z_m = \prod_{i=1}^{m} \frac{1}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega_i}{T}}} \qquad (3.16)'$$

لنفرض الآن أن للهزازات ذات التواتر $\omega_1 = \dots \omega_m = \omega$ ولنحسب عدد الحالات المتاحة للطاقة الكلية للنظمة $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{m}{2}\right)$ أي عدد التوزيعات الممكنة للأعداد الكمومية n_1 ، $n_2 \cdots n_m$ بحيث يكون مجموعها هو n : $n = n_1 + n_2 + \dots n_m$. نحصل على هذا التوزيع بتصور الأعداد n_1 ، $n_2 \cdots n_m$ ككرات بيضاء تفصلها عن بعضها حواجز، كرات حمراء عددها $m - 1$ والمسألة إذاً هي كيف توزع n كرة بيضاء في مجموعة من الكرات مؤلفة من $n + m - 1$ كرة. إنه عدد التوافقات n في هذه المجموعة أي

$$\frac{(n+m-1)!}{n!(m-1)!}$$

وهكذا فإن Z_m هو

$$Z_m = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n+m-1)!}{n!(m-1)!} e^{\frac{\hbar\omega}{T}\left(n+\frac{m}{2}\right)} \qquad (3.18)$$

يجب أن يساوي هذا المقدار (3.16) من أجل $\omega_1 = \omega_2 = \dots = \omega_m$

$$= \frac{e^{-\frac{m}{2}\frac{\hbar\omega}{T}}}{\left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{T}}\right)^m} = e^{-\frac{m}{2}\frac{\hbar\omega}{T}} \sum_{n=0}^{\infty} \binom{-m}{n} (-1)^n e^{-\frac{\hbar\omega}{T}n}$$

حيث استعملنا علاقة ثنائي الحد المعممة إلى القوى السالبة والتي يمكن برهانها بالتكرار[5] انطلاقاً من $\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x}$ و $\binom{m+n-1}{n} = \binom{-m}{n}(-1)^n$ تعريفاً، كما في (3.18).

---

[5] لدينا إذاً باشتقاق $\frac{1}{1-x}$: $\frac{1}{(1-x)^2} = \sum_{n=1}^{\infty} nx^{n-1} = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)x^n$

العلاقة صحيحة من أجل $m = 1, 2$ لنفرض أنها صحيحة من أجل m

$$\frac{1}{(1-x)^m} = \sum_{n=0}^{\infty} \binom{m+n-1}{n} x^n \qquad (1)$$

يجب أن نبرهن أن العلاقة صحيحة من أجل $m + 1$.

نضع $k = m + n - 1$ مع الملاحظة أن $\binom{m+n-1}{n} = \binom{m+n-1}{m-1}$ ونكتب (1) على الشكل

$$\frac{1}{(1-x)^m} = \sum_{k=m-1}^{\infty} \binom{k}{m-1} x^{k-(m-1)}$$

ونحصل بالاشتقاق على

$$\frac{m}{(1-x)^{m+1}} = \sum_{k=m}^{\infty} [k-(m-1)] \binom{k}{m-1} x^{k-(m-1)-1}$$

$$k - (m-1) - 1 = k - m = n$$

$$\frac{k-(m-1)}{m}\binom{k}{m-1} = \frac{k!}{m!(k-m)!}$$

نضع $k - (m-1) - 1 = n$

والعلاقة صحيحة من أجل $m + 1$.

لننظر الآن إلى احتمال وقوع الهزاز التوافقي ذي الطاقة E_n في الوضع q. إن احتمال حصوله على الطاقة E_n هو $\rho_n = \frac{e^{-\frac{E_n}{T}}}{Z}$ واحتمال وقوعه في النقطة q هي $|\psi_n(q)|^2$ عندما تكون طاقته E_n، وهما احتمالان مستقلان عن بعضهما واحتمال وقوعهما معاً هو جداءهما

$$\frac{e^{-\frac{E_n}{T}}}{Z}|\psi_n(q)|^2$$

أما احتمال وقوع الهزاز في النقطة q أياً كانت طاقته فهو بالجمع على كل الطاقات الممكنة نكتبه

$$dP_q = a\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{E_n}{T}}|\psi_n(q)|^2 dq \qquad (3.19)$$

حيث a ثابتة تنظيم يجب حسابها مستعينين بخواص متجهة حالة الهزاز التوافقي التي رأيناها في (3§ 2 IV,). إنها من جهة متجهة حقيقية $|\psi_n(q)|^2 = \psi_n^2(q)$، ومن جهة ثانية فإن عناصر المصفوفة q معدومة ماعدا تلك الواقعة فوق قطر المصفوفة وتحته أي العناصر من الشكل $q_{n+1,n}$ و $q_{n,n-1}$؛ $q_{-1,0} = 0$ و $q_{n,n+1} = q_{n+1,n}$. نأخذ مشتق كثافة الاحتمال (3.19) بالنسبة لـ q

$$\frac{d^2P_q}{dq^2} = 2a\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{E_n}{T}}\left(\frac{d}{dq}|\psi_n(q)\rangle\right)|\psi_n(q)\rangle$$

لكن $\frac{d}{dq} = \frac{i}{\hbar}p$ حيث p مؤثر الاندفاع الخطي الذي يتمتع بنفس خواص المؤثر q

$$p|\psi_n\rangle = \sum_k p_{kn}|\psi_k\rangle = p_{n+1,n}|\psi_{n+1}\rangle + p_{n-1,n}|\psi_{n-1}\rangle$$

ولدينا حسب (((IV.(2.(3.28 $\quad p_{n\pm1,n} = \pm i\omega q_{n\pm1,n}$

ومنه

$$\frac{d|\psi_n(q)\rangle}{dq} = \frac{\omega}{\hbar}\left(q_{n-1,n}|\psi_{n-1}\rangle - q_{n+1,n}|\psi_{n+1}\rangle\right) \qquad (1)$$

و

$$\frac{d^2P_q}{dq^2} = \frac{2a\omega}{\hbar}\left\{\sum_{n=0}^{\infty} q_{n-1,n}|\psi_{n-1}\rangle|\psi_n\rangle e^{-\frac{E_n}{T}} - \sum_{n=0}^{\infty} q_{n+1,n}|\psi_{n+1}\rangle|\psi_n\rangle e^{-\frac{E_n}{T}}\right\} \qquad (2)$$

نقوم بتغيير n إلى $n' = n - 1$ في المجموع الأول ونأخذ بعين الاعتبار أن $E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$ لنجد

$$\frac{d^2P_q}{dq^2} = -\frac{2a\omega}{\hbar}\left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{T}}\right)\sum_{n=0}^{\infty} q_{n,n+1}|\psi_n\rangle|\psi_{n+1}\rangle e^{-\frac{E_n}{T}} \qquad (3)$$

نصل بنفس الشكل من حساب $q|\psi_n\rangle = q_{n\pm1,n}|\psi_{n\pm1}\rangle$ إلى

$$q\frac{dP_q}{dq} = a\left(1 + e^{-\frac{\hbar\omega}{T}}\right)\sum_{n=0}^{\infty} q_{n,n+1}|\psi_n\rangle|\psi_{n+1}\rangle e^{-\frac{E_n}{T}} \qquad (4)$$

التي تتيح لنا حساب المجموع $\sum_{n=0}^{\infty} q_{n,n+1}|\psi_n\rangle|\psi_{n+1}\rangle e^{-\frac{E_n}{T}}$ بدليل $q\frac{dP_q}{dq}$، نضعه في (3) ونحصل على

$$\frac{d^2P_q}{dq^2} = -\frac{2\omega}{\hbar} th \frac{\hbar\omega}{2T} q \frac{dP_q}{dq} \quad (5)$$

نكامله فنحصل على

$$\frac{dP_q}{dq} = ce^{-q^2 \frac{\omega}{\hbar} th \frac{\hbar\omega}{2T}} = ce^{-\alpha q^2} \quad (6)$$

وبالمكاملة ثانية نحصل على ثابتة التنظيم c

$$1 = P_q = c\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-q^2\alpha} dq = c\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \;؛\; c = \left(\frac{\omega}{\pi\hbar} th \frac{\hbar\omega}{2T}\right)^{1/2} \quad (7)$$

ومنه

$$dP_q = \left(\frac{\omega}{\pi\hbar} th \frac{\hbar\omega}{2T}\right)^{1/2} e^{-q^2 \frac{\omega}{\hbar} th \frac{\hbar\omega}{2T}} dq \quad (3.20)$$

يأخذ هذا الاحتمال من أجل درجات الحرارة المنخفضة $T << \hbar\omega$ ، $th \to 1$ الشكل

$$dP_q = \left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-\frac{q^2\omega}{\hbar}} dq = |\psi(q)|^2 \quad (3.21)$$

إنه ببساطة احتمال وجود الهزاز في حالة القاع $[n = 0$ ، $H_0 = 1$ في العلاقة (((3.18).2).IV) حيث استعملنا الإحداثيات النظامية[6] normal في معادلة الهزاز. تتجمد كل الطاقات ماعدا هذه الطاقة وتصبح حالة الهزاز حالة نقية. وعلى العكس نحصل على التوزع التقليدي لوضع الهزاز من أجل درجات الحرارة المرتفعة $T >> \hbar\omega$ ، $th\frac{\hbar\omega}{2T} \simeq \frac{\hbar\omega}{2T}$

$$dP_q = \frac{\omega}{\sqrt{2\pi T}} e^{-\frac{q^2\omega^2}{2T}} dq \quad (3.22)$$

إنه توزع بولتزمان في الإحداثيات النظامية.

4.3- التقريب شبه التقليدي، تقريب بولتزمان لغاز وحيد الذرات

لنحسب توزع بولتزمان في التقريب شبه التقليدي لغاز كامل مكون من جزيئات. نكتب طاقة الجزيء ε_k على الشكل

$$\varepsilon_k = \frac{p^2}{2m} + \varepsilon_k'$$

[6] نكتب معادلة طاقة الهزاز $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}x^2$ حيث $k = \omega^2 m$ على الشكل $E = \frac{1}{2}\left(p^2 + \omega^2 q^2\right)$ حيث استبدلنا بـ x ، $q = \sqrt{m}\, x$ وبـ p ، $p = \frac{p}{\sqrt{m}}$ ، q و p هما الإحداثيات النظامية ولذا لا تظهر m في (3.21).

حيث $\frac{p^2}{2m}$ هي الطاقة الحركية شبه التقليدية للجزيء و ε'_k مستوى الطاقة الدورانية والداخلية للجزيء. ε'_k لا تتوقف على سرعة مركز كتلة الجزيء ولا على إحداثياته ونفترض عدم وجود أي حقل خارجي. كتبنا في ('(II.3.(2.20 طاقة هيلمهولتز الحرة على الشكل

$$F = -NTLn\left[\frac{eV}{N}(2\pi mT)^{3/2}\sum_k e^{-\frac{\varepsilon'_k}{T}}\right]$$

حصلنا على المعامل $(2\pi mT)^{3/2}$ في حساب $\int e^{-\frac{p^2}{2mT}}d\bar{p}$. لا يختلف الأمر في الحساب شبه التقليدي سوى في وضع $(2\pi\hbar)^3$ في مخرج هذه العلاقة، حيث 3 هو عدد درجات الحرية ولدينا إذاً

$$F = -NTLn\left[\frac{eV}{N}\frac{(2\pi mT)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}\sum_k e^{-\frac{\varepsilon'_k}{T}}\right] \tag{3.23}$$

أو

$$F = -NT\left[1 + Ln\frac{V}{N} + Ln\left(\frac{mT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}\sum_k e^{-\frac{\varepsilon'_k}{T}}\right]$$

يقابل الحد الأخير بين المعقوفتين التابع لدرجة الحرارة وحدها الدالة $f(T)$ التي عرفناها في الحساب التقليدي ولا يختلف عنه إلا بوجود $(2\pi\hbar)^3$ في المخرج الذي يستبدل النقطة في فضاء الطور بخلية. لا يمكننا بطبيعة الحال حساب الصيغة بين المعقوفتين بدون معرفة خواص الجزيئات التي يتكون منها الغاز والتي تتيح لنا حساب المقدار $\sum_k e^{-\frac{\varepsilon'_k}{T}}$.

يمكن لمستويات الطاقة ε'_k أن تكون متدنية ولذا يجب ضرب الحد المقابل لها في المجموع $\sum_k$ بدرجة التدني التي نرمز لها بـ g_k ويصبح المجموع – وهو في واقع الأمر دالة تجزئة–

$$Z = \sum_k g_k e^{-\frac{\varepsilon'_k}{T}} \tag{3.24}$$

ولذا يطلق على g_k اسم الوزن الإحصائي للطاقة.

ونكتب صيغة F على الشكل

$$F = -NTLn\left[\frac{eV}{N}\left(\frac{mT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} Z\right] \tag{3.25}$$

ونقتصر لدراسة Z على حالة الغاز وحيد الذرات مبتدئين بالملاحظة الهامة التالية : يزداد عدة الذرات المحرضة، التي تزيد مستويات الطاقة فيها عن مستوى القاع أو التي أصبحت في الطيف المتصل – تلك التي أصبحت مؤينة–، بازدياد درجة الحرارة. إلا أنه عندما لا تكون درجة الحرارة مرتفعة جداً – لا ننسى أن الإلكترون فولت يساوي 11606 درجة وأن طاقة تأيين الهدروجين على سبيل المثال هي 13,6eV –، فإن عدد الذرات المؤئنة مهمل. إلا أنه يمكن اعتبار الغاز مؤئناً في درجات حرارة من رتبة درجة حرارة

التأيين T_{ion} بدون الانتظار لتصبح درجة الحرارة T أكبر بكثير منها. هذا يعني أنه لا يمكن اعتبار الغاز غير مؤين إلا من أجل درجات حرارة $T << T_{ion}$. هذا من جهة، ومن جهة أخرى فقد رأينا في (((IV.(3.(3.13 أن مستويات طاقة ذرة الهدروجين معينة بالعلاقة $E_n = -\frac{E_R}{n^2}$ وبالتالي فإن نسبة احتمال وجود الذرة في المستوى 2 بالنسبة لمستوى القاع $\varepsilon_0 = 13,6eV$، هو

$$\frac{e^{\frac{1}{4}\beta\varepsilon_0}}{e^{\beta\varepsilon_0}} = e^{-\frac{3}{4}\beta\varepsilon_0}$$

وهو احتمال ضعيف جداً حتى في درجات الحرارة المرتفعة جداً $T = \frac{1}{k\beta} = 10000°K$.

أضف إلى ذلك أن مستوى القاع غير متدني عندما لا يكون للذرة عزم مداري أو عزم سبين $(L = S = 0)$ وهذا هو حال الغازات النادرة. وهكذا تأخذ Z الشكل البسيط التالي

$$Z = e^{-\frac{\varepsilon_0}{T}} = 1$$

حيث اعتبرنا طاقة القاع ε_0 مبدأ قياس الطاقة.

يرينا هذا التبسيط أن الفرق الوحيد بينه وبين طاقة هيلمهولتز التقليدية هو في صيغة الدالة $f(T)$ التي أصبحت عوضاً عن (((II.(3.(2.31 $f(T) = -TLn(2\pi mT)^{3/2}$

$$f(T) = -TLn\left(\frac{mT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \quad (3.26)$$

لا يتغير شيء في حساب c_V من $E = F + TS = Nf(T) - NTf'(T)$ و $S = -\frac{\partial F}{\partial T}$

$$c_V = \frac{1}{N}C_V = \frac{1}{N}\frac{\partial E}{\partial T} = -Tf''(T) = \frac{3}{2}$$

كاملنا هذه العلاقة مرتين للحصول على $f(T)$

$$f(T) = -c_V TLnT - \zeta T + \varepsilon_0$$

$\varepsilon_0 = 0$؛ نقارن هذه العلاقة بـ (3.26) لنجد بوضع $c_V = \frac{3}{2}$ قيمة ثابتة الغاز الكيميائية

$$\zeta = \frac{3}{2}Ln\frac{m}{2\pi\hbar^2} \quad (3.27)$$

نكتب الكمون الترموديناميكي ϕ بأخذ معادلة الغاز الكامل بعين الاعتبار، $PV = NT$

$$\phi = F + PV = -NTLn\left(\frac{eT}{P}\right) + Nf(T) + NT$$

$$\phi = NTLnP - NTLnT - Nc_V TLnT - N\zeta T \quad (3.28)$$

ومنه، بتبديل c_V و ζ بقيمتهما

$$\mu = \frac{\phi}{N} = TLn\left[P - \frac{5}{2}T - \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}\right]$$

$$\mu = T\mathrm{Ln}\left[\frac{P}{T^{5/2}}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{m}\right)^{3/2}\right] = T\left[\mathrm{Ln}\frac{N}{V}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mT}\right)^{3/2}\right] \qquad (3.29)$$

تتزايد قيمة الكمون بشكل لوغاريتمي بازدياد الضغط، أي بازدياد كثافة الغاز حسب المساوتين الأخيرتين في هذه العلاقة. ونعبر الآن عن شرط تطبيق توزع بولتزمان $e^{\frac{\mu}{T}} << 1$ الذي سنراه في الفصل القادم ((2.25).2) بالشرط المكافئ

$$\frac{N}{V}\left(\frac{\hbar^2}{mT}\right)^{3/2} << 1 \qquad (3.30)$$

يتطلب هذا الشرط أن يكون الغاز مخلخلاً بما فيه الكفاية، من أجل درجة حرارة معطاة. تبين القيم العددية عند إدخالها في هذا الشرط أنه غير قابل للتحقق عندما تصل كثافة الغاز وحيد الذرات أو الجزيئي إلى حد تصبح معه الاصطدامات بين جسيمات الغاز ممكنة وملحوظة.

لعله من المفيد تفسير معيار تطبيق توزع بولتزمان (3.30) بالقول إنه يعني أن عدد الحالات الكمومية كبير جداً أمام عدد الجسيمات على النحو التالي : إن طاقة الغالبية العظمى للذرات هي من رتبة T، عزمها الخطي هو من رتبة $(mT)^{1/2}$ والحجم الذي تحتله كل الذرات في فضاء الطور هو من رتبة $V(mT)^{3/2}$. يقابل هذا الحجم في التقريب شبه التقليدي عدد حالات كمومية من رتبة $\frac{V(mT)^{3/2}}{\hbar^3}$ (أهملنا في كل هذه التقريبات الأعداد، $\sqrt{2}$، 2π، الخ). ترينا (3.30) أن هذا العدد كبير جداً أمام عدد الذرات.

لنلاحظ أخيراً أن شرط بولتزمان يعني أن $\mu < 0$: أن الكمون الكيميائي لغاز بولتزمان سالب دوماً.

4. حرارة الجسم الصلب النوعية

1.4- اهتزازات نظمة ذات s درجة حرية

لتكن q_{i_0}، $i = 1, \dots s$ أوضاع التوازن الميكانيكي لمختلف درجات الحرية. نرمز بـ $x_i = q_i - q_{i_0}$ لانزياح طفيف لدرجة الحرية عن وضع التوازن وننشر الطاقة الكامنة للنظمة $U(q_1, \dots, q_s)$ في جوار الوضع حيث $U(q_{1_0}, \dots, q_{s_0}) = 0$ هو مبدأ الطاقة الكامنة وحيث المشتق الأول يساوي الصفر أيضاً

$$U(x_1 \dots x_s) = \frac{1}{2}\sum_{i,k}^{s}\left.\frac{\partial^2 U}{\partial q_i \partial q_k}\right|_{q_i = q_{i_0}, q_k = q_{k_0}} x_i x_k$$

نكتب هذه الطاقة على الشكل

$$\mu = T\text{Ln}\left[\frac{P}{T^{5/2}}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{m}\right)^{3/2}\right] = T\left[\text{Ln}\frac{N}{V}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mT}\right)^{3/2}\right] \quad (3.29)$$

تتزايد قيمة الكمون بشكل لوغاريتمي بازدياد الضغط، أي بازدياد كثافة الغاز حسب المساوتين الأخيرتين في هذه العلاقة. ونعبر الآن عن شرط تطبيق توزع بولتزمان $e^{\frac{\mu}{T}} << 1$ الذي سنراه في الفصل القادم ((2.25).2) بالشرط المكافئ

$$\frac{N}{V}\left(\frac{\hbar^2}{mT}\right)^{3/2} << 1 \quad (3.30)$$

يتطلب هذا الشرط أن يكون الغاز مخلخلاً بما فيه الكفاية، من أجل درجة حرارة معطاة. تبين القيم العددية عند إدخالها في هذا الشرط أنه غير قابل للتحقق عندما تصل كثافة الغاز وحيد الذرات أو الجزيئي إلى حد تصبح معه الاصطدامات بين جسيمات الغاز ممكنة وملحوظة.

لعله من المفيد تفسير معيار تطبيق توزع بولتزمان (3.30) بالقول إنه يعني أن عدد الحالات الكمومية كبير جداً أمام عدد الجسيمات على النحو التالي : إن طاقة الغالبية العظمى للذرات هي من رتبة T، عزمها الخطي هو من رتبة $(mT)^{1/2}$ والحجم الذي تحتله كل الذرات في فضاء الطور هو من رتبة $V(mT)^{3/2}$. يقابل هذا الحجم في التقريب شبه التقليدي عدد حالات كمومية من رتبة $\frac{V(mT)^{3/2}}{\hbar^3}$ (أهملنا في كل هذه التقريبات الأعداد، $\sqrt{2}$، 2π، الخ). ترينا (3.30) أن هذا العدد كبير جداً أمام عدد الذرات.

لنلاحظ أخيراً أن شرط بولتزمان يعني أن $\mu < 0$: أن الكمون الكيميائي لغاز بولتزمان سالب دوماً.

4. حرارة الجسم الصلب النوعية

1.4- اهتزازات نظمة ذات s درجة حرية

لتكن q_{i_0}، $i = 1, \ldots s$ أوضاع التوازن الميكانيكي لمختلف درجات الحرية. نرمز بـ $x_i = q_i - q_{i_0}$ لانزياح طفيف لدرجة الحرية عن وضع التوازن وننشر الطاقة الكامنة للنظمة $U(q_1, \ldots, q_s)$ في جوار هذا الوضع حيث $U(q_{1_0}, \ldots, q_{s_0}) = 0$ هو مبدأ الطاقة الكامنة وحيث المشتق الأول يساوي الصفر أيضاً

$$U(x_1 \ldots x_s) = \frac{1}{2}\sum_{i,k}^{s} \left.\frac{\partial^2 U}{\partial q_i \partial q_k}\right|_{q_i = q_{i_0}, q_k = q_{k_0}} x_i x_k$$

نكتب هذه الطاقة على الشكل

$$U = \frac{1}{2}\sum_{i,k} a_{ik} x_i x_k \qquad (4.1)$$

$a_{ik} = a_{ki}$؛ نكتب الطاقة الحركية بنفس الشكل

$$T = \frac{1}{2}\sum_{i,k} b_{ik}(q) q_i' q_k' \qquad (4.2)$$

حيث q_i' $(i = 1, \dots s)$ هي السرعات العامة. نفرض أن المعاملات $b_{ik}(q)$ ثابتة ونرمز لها بـ $m_{ik} = b_{ik}(q) = b_{ik}(q_0)$؛ إنها ثوابت تعمم مفهوم الكتلة، $m_{ik} = m_{ki}$

$$T = \frac{1}{2}\sum_{i,k} m_{ik} x_i' x_k' \qquad (4.2)'$$

نكتب معادلات الحركة انطلاقاً من اللاغرنجي $L = T - U$، $\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial x_i'} = 0$:

$$\sum_{k=1}^{s} m_{ik} x_k'' + a_{ik} x_k = 0$$

لدينا s معادلة خطية متجانسة بـ s مجهولاً. نضع $x_k = A_k e^{i\omega t}$ في هذه المعادلات فنحصل على s معادلة خطية متجانسة بالمقادير A_k. يلزم أن يكون معين الأمثال فيها مساوياً للصفر حتى لا يكون الحل تافهاً : $A_k = 0$ من أجل كل k.

$$\left|a_{ik} - m_{ik}\omega^2\right| = 0 \qquad (4.3)$$

نحصل من هذه المعادلة على s جذر حقيقي وموجب بـ ω^2 [7]، نرمز لها بـ ω_α^2. يطلق على ω_α اسم تواترات النظمة الخاصة. ونحصل بالتالي، عندما تكون الجذور ω_α^2 مختلفة، على s مقداراً A_k مختلفة معرفة بثابتة اعتباطية c_α مضروبة بالصغير المقابل $\Delta_{k\alpha}$. ونكتب x_k على الشكل

$$x_k = \sum_\alpha c_\alpha \Delta_{k\alpha} e^{i\omega_\alpha t} \qquad (4.4)$$

أي أن تغيرات إحداثيات النظمة هي توضيع لـ s هزاز توافقي

$$\theta_\alpha = c_\alpha e^{i\omega_\alpha t} \qquad (4.5)$$

سعتها وطورها اعتباطيان لكن تواترها معرف تماماً، معادلة حركتها هي معادلة حركة الهزاز التوافقي

$$\theta_\alpha'' + \omega_\alpha^2 \theta_\alpha = 0$$

يمكن النظر إلى θ_α كإحداثيات عامة جديدة تحل محل x_k، تسمى الإحداثيات النظامية وتواتراتها البسيطة – خلافاً لتواترات x_k في (4.4) – الاهتزازات النظامية. لنلاحظ أن المعين (4.3) الذي نكتبه على الشكل

$$\left|\frac{a_{ik}}{m_{ik}\omega^2} - \delta_{ik}\right| = 0$$

---

[7] إن ω^2 حقيقي لأن المصفوفتين m_{ik} و a_{ik} هيرميتيتان (حقيقيتان هنا) وعناصرها موجبة $m_{ik} > 0$ و $a_{ik} > 0$ لأن الطاقة الحركية موجبة بالضرورة والطاقة الكامنة موجبة لأنها المشتق الثاني لـ U في جوار وضع التوازن $\omega^2 = \sum_k \frac{a_{ik}}{m_{ik}} > 0$.

هو في واقع الأمر كتابة كل من الطاقتين الكامنة والحركية على شكل مربع كامل، أي حذف كل الحدود المستطيلة. نرمز للعناصر القطرية m_{ii} بـ m_α في الإحداثيات النظامية ولـ a_{ii} بـ $m_\alpha\omega_\alpha^2$ ونكتب الطاقة الكلية على الشكل

$$E = \frac{1}{2}\sum_\alpha m_\alpha\theta_\alpha'^2 + m_\alpha\omega_\alpha^2\theta_\alpha^2 = \frac{m_\alpha}{2}\sum\theta_\alpha'^2 + \omega_\alpha^2\theta_\alpha^2$$

ونتخلص من m_α بأخذ الإحداثيات $Q_\alpha = \sqrt{m_\alpha}\theta_\alpha$ والاندفاعات $P_\alpha = \sqrt{m_\alpha}\theta_\alpha'$

$$E = \frac{1}{2}\left(P_\alpha^2 + \omega_\alpha^2 Q_\alpha^2\right) \qquad (4.6)$$

2.4– الأجسام الصلبة

تتميز هذه الأجسام بقيام ذراتها بحركات اهتزازية حول نقاط، أوضاع توازن، هي عقد الشبكة البلورية. هذا يعني أن الذرات تحتل هذه النقاط في حالة التوازن الترموديناميكي وأن الجسم الصلب متبلور تماماً. ولكن ليس لكل الأجسام الصلبة تكوين بلوري ففي الأجسام الصلبة اللابلورية amorphous تهتز الذرات حول نقاط موزعة بشكل عشوائي، وهي أجسام غير مستقرة من وجهة النظر الترموديناميكية وعليها بالتالي أن تتبلور بمرور الزمن. إلا أن زمن الارتخاء، زمن العودة إلى التوازن الترموديناميكي، طويل جداً بحيث يمكن اعتبار الأجسام اللابلورية كأجسام مستقرة. وهكذا فإن الحسابات التي سنقوم بها تنطبق على الأجسام البلورية واللابلورية على حد سواء. الفارق الوحيد بينهما، في درجات الحرارة المنخفضة، أن أنتروبية الأجسام اللابلورية لا تتناهى إلى الصفر مع $T \to 0$ لأنها خارجة عن حالة التوازن، ولا بد من إضافة حد S_0 إلى حد الأنتروبية المتناسب مع T الذي سنحصل عليه من أجل الأجسام البلورية، مع أن هذا الحد لا يلعب أي دور في حساب الحرارة النوعية التي تهمنا هنا. قد يحدث أيضاً أن تطرأ عيوب على البلورة، أن لا تقع الذرة في جوار العقدة، في المكان المخصص لها إن صح التعبير وإنما في جوار عقدة أخرى. فالعيوب إذاً هي ألا يكون احتمال وجود الذرة في "مكانها" مساوياً للواحد، والترتيب تام عندئذ، وإنما أقل من ذلك – الحالات المتاحة أكثر من واحدة. إن البلورة مرتبة تماماً في الصفر المطلق إلا أن العودة إلى الترتيب التام، في حال وجود عيوب في درجات الحرارة المرتفعة، قد تستغرق زمناً طويلاً، وتبقى العيوب في درجات الحرارة المنخفضة : "تتجمد" العيوب ولابد كما في حال الأجسام اللابلورية من إضافة حد إضافي، S_0، إلى الأنتروبية. يمكن على سبيل المثال لبلورة أوكسيد الكربون CO أن تأخذ اتجاهين متعارضين بتبديل الذرتين C و O إن عدد الحالات المتاحة، بفرض تساوي الاحتمال في الاتجاهين لكل ذرة هو 2 و $S_0 = Ln2$.

إن الطاقة الحركية للذرات في الصفر المطلق تساوي الصفر وللطاقة الكامنة قيمة صغرى في حال التوازن ولهذا فلا يمكن للذرات إلا القيام بحركات اهتزازية صغيرة، تنزاح فيها انزياحاً طفيفاً عن وضع التوازن.

وهكذا فإن كل الأجسام أجسام صلبة في درجات الحرارة المنخفضة – القريبة من الصفر المطلق. لا يشذ عن هذه القاعدة إلا حالات استثنائية منشؤها كمومي بحت على غرار الهليوم المائع، وهو الجسم الوحيد الذي يبقى مائعاً في درجة الحرارة $T = 0$ (في ضغوط أقل من 25 ضغط جوي). أما كل المواد الأخرى فتصبح صلبة قبل أن تسيطر المفاعيل الكمومية. وهي مفاعيل تعظم عندما تأخذ أطوال موجة دوبري $\lambda = \frac{h}{p}$ قيماً قريبة من المسافة الفاصلة بين الذرات – أي المقدار $2\text{-}3°K$ من أجل الهليوم المائع.

لا يبقى الجسم الصلب على حالته الصلبة عندما ترتفع درجة الحرارة إذ يصبح سائلاً كما رأينا في فصل عبور الطور في المجلد الثاني أو يتفكك. ويبقى صلباً عندما تكون درجة الحرارة صغيرة أمام طاقة تفاعل الذرات التي كتبناها على الشكل (4.1).

ليكن N عدد بلورات الجسم الصلب البدائية و ν عدد الذرات في كل بلورة (خلية بدائية). إن العدد الكلي لدرجات الحرية هو $3N\nu$ وهي تشمل 3درجات حرية لانسحاب الجسم الصلب ككل وثلاث درجات أخرى لدورانه ككل. يبقى إذاً كدرجات حرية اهتزازية $M = 3N\nu - 6 \simeq 3N\nu$. سنهمل درجات الحرية الداخلية للذرات في الوقت الراهن، إنها درجات الحرية الإلكترونية الهامة في المعادن والتي سندرسها مستقبلاً ولا نأخذ بعين الاعتبار إلا درجات الحرية الاهتزازية المؤلفة من هزازات توافقية مستقلة عن بعضها، عددها $M = 3N\nu$. ولتكن $N\varepsilon_0$ طاقة تفاعل الذرات في حالة التوازن، نضيفها إلى تعريف F في (2.11) ونكتب

$$F = N\varepsilon_0 - TLnZ$$

حيث Z معطاة بـ '(3.16) من أجل مختلف مقامات Modes الاهتزاز ω_α $\alpha = 1, \dots M$ وحيث أهملنا طاقة القاع

$$F = N\varepsilon_0 + T\sum_\alpha Ln\left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega_\alpha}{T}}\right) \qquad (4.7)$$

3.4– حالة درجات الحرارة المنخفضة

لا تسهم في F في هذه الحالة إلا الحدود التي تأخذ $\hbar\omega_\alpha$ فيها قيماً من رتبة T أي التواترات الضعيفة. ومن جهة أخرى فإن التواترات الضعيفة تقابل الأمواج الصوتية، وهي أمواج أطوالها كبيرة بالنسبة لخطوة الشبكة البلورية، المسافة a الفاصلة بين عقدتين : $\lambda >> a$. أي أن

$$T \sim \hbar\omega = \hbar\frac{2\pi}{\lambda}v << \frac{\hbar v}{a} \qquad (4.8)$$

حيث v سرعة الصوت.

يمكن النظر في هذه الحالة إلى الجسم الصلب كوسط مرن متصل، ذلك أن كون $a << \lambda$ يجعلنا نعتبر انحرافات الذرات عن وضع التوازن متساوية فيما بينها، وهو أمر لا يمكننا قبوله عندما تكون $a >> \lambda$؛ وهكذا فإن كثافة الاهتزازات الخاصة متناسبة مع $Vd\bar{p}$ حيث V هو حجم الجسم الصلب، مثل التناسب هو g، تدني الاهتزازات في الصورة و $(2\pi\hbar)^3$ في المخرج[8]. كتبناها على شكل تفاضل لأن M عدد كبير جداً. إنها إذاً

$$\frac{gVd\bar{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{gV4\pi p^2dp}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{gVk^2dk}{2\pi^2} = \frac{gV\omega^2d\omega}{2\pi^2v^3} \qquad (4.9)$$

حيث كتبنا عنصر الحجم في الإحداثيات الكروية، $\bar{p} = \hbar\bar{k}$ ، $k = \frac{\omega}{v}$.

يمكن للأمواج الصوتية، خلافاً للأمواج الضوئية أن تكون طولانية، في اتجاه الانتشار، بالإضافة إلى العرضانية العمودية عليه – ذات الاستقطابين : $g = 2$. $g = 1$ من أجل الطولانية. نرمز بـ v_t لسرعة الانتشار العرضانية و v_ℓ للطولانية. ونكتب السرعة في مخرج الحد الأخير على الشكل

$$\frac{3}{v^3} = \frac{2}{v_t^3} + \frac{1}{v_\ell^3} = \frac{3}{\langle v\rangle^3}$$

والطرف الأخير في (4.9) هو $\frac{3V\omega^2d\omega}{2\pi^2\langle v\rangle^3}$. إنه عنصر التكامل في (4.7) عندما نحول الجمع على كل الـ α إلى تكامل بين الصفر واللانهاية وهو ما يتيحه التقارب السريع لهذا التكامل من أجل درجات الحرارة الصغيرة :

$$F = N\varepsilon_0 + \frac{3TV}{2\pi^2\langle v\rangle^3}\int_0^\infty \mathrm{Ln}\left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{T}}\right)\omega^2d\omega \qquad (4.10)$$

نضع $\frac{\hbar\omega}{T} = x$ و نكامل بالتجزئة فنحصل على

$$\int_0^\infty \mathrm{Ln}\left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{T}}\right)\omega^2d\omega = -\frac{1}{3}\left(\frac{T}{\hbar}\right)^3\int_0^\infty \frac{x^3dx}{e^x - 1}$$

نبين في الملحق أن قيمة هذا التكامل هي $\frac{\pi^4}{15}$ ومنه

$$F = N\varepsilon_0 - \frac{V\pi^2T^4}{30\left(\hbar\langle v\rangle\right)^3} \equiv N\varepsilon_0 - T\mathrm{Ln}Z \qquad (4.11)$$

---

[8] رأينا في دروس ميكانيك الكم أن كثافة التيار – ببعد واحد – هي $\frac{d\bar{p}}{(2\pi\hbar)}$ وهكذا فإن كثافة التيار الكلي بثلاثة أبعاد في واحدة الحجوم هي $\frac{d\bar{p}}{(2\pi\hbar)^3}$. نصل إلى ذات النتيجة عندما تأخذ الأعداد الكمومية لجسيم في بئر كمون قيماً كبيرة. نكتب $n_i = \frac{d_i}{2\pi}$ ، $i = x, y, z$ و d_i بعد البئر $dn_i = \frac{d_ik_i}{2\pi}$ و

$$\prod_i dn_i = \frac{V}{(2\pi)^3}\prod_i dk_i = \frac{V}{(2\pi)^3}d\bar{k}$$

يمكن النظر في هذه الحالة إلى الجسم الصلب كوسط مرن متصل، ذلك أن كون $a << \lambda$ يجعلنا نعتبر انحرافات الذرات عن وضع التوازن متساوية فيما بينها، وهو أمر لا يمكننا قبوله عندما تكون $a >> \lambda$؛ وهكذا فإن كثافة الاهتزازات الخاصة متناسبة مع $Vd\bar{p}$ حيث V هو حجم الجسم الصلب، مثل التناسب هو g، تدني الاهتزازات في الصورة و $(2\pi\hbar)^3$ في المخرج[8]. كتبناها على شكل تفاضل لأن M عدد كبير جداً. إنها إذاً

$$\frac{gVd\bar{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{gV4\pi p^2dp}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{gVk^2dk}{2\pi^2} = \frac{gV\omega^2d\omega}{2\pi^2v^3} \qquad (4.9)$$

حيث كتبنا عنصر الحجم في الإحداثيات الكروية، $\bar{p} = \hbar\bar{k}$، $k = \frac{\omega}{v}$.

يمكن للأمواج الصوتية، خلافاً للأمواج الضوئية أن تكون طولانية، في اتجاه الانتشار، بالإضافة إلى العرضانية العمودية عليه – ذات الاستقطابين : $g = 2$. $g = 1$ من أجل الطولانية. نرمز بـ v_t لسرعة الانتشار العرضانية و v_ℓ للطولانية. ونكتب السرعة في مخرج الحد الأخير على الشكل

$$\frac{3}{v^3} = \frac{2}{v_t^3} + \frac{1}{v_\ell^3} = \frac{3}{\langle v\rangle^3}$$

والطرف الأخير في (4.9) هو $\frac{3V\omega^2d\omega}{2\pi^2\langle v\rangle^3}$. إنه عنصر التكامل في (4.7) عندما نحول الجمع على كل الـ α إلى تكامل بين الصفر واللانهاية وهو ما يتيحه التقارب السريع لهذا التكامل من أجل درجات الحرارة الصغيرة :

$$F = N\varepsilon_0 + \frac{3TV}{2\pi^2\langle v\rangle^3}\int_0^\infty Ln\left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{T}}\right)\omega^2d\omega \qquad (4.10)$$

نضع $\frac{\hbar\omega}{T} = x$ و نكامل بالتجزئة فنحصل على

$$\int_0^\infty Ln\left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{T}}\right)\omega^2d\omega = -\frac{1}{3}\left(\frac{T}{\hbar}\right)^3\int_0^\infty \frac{x^3dx}{e^x - 1}$$

نبين في الملحق أن قيمة هذا التكامل هي $\frac{\pi^4}{15}$ ومنه

$$F = N\varepsilon_0 - \frac{V\pi^2T^4}{30(\hbar\langle v\rangle)^3} \equiv N\varepsilon_0 - TLnZ \qquad (4.11)$$

---

8 رأينا في دروس ميكانيك الكم أن كثافة التيار – ببعد واحد – هي $\frac{d\bar{p}}{(2\pi\hbar)}$ وهكذا فإن كثافة التيار الكلي بثلاثة أبعاد في واحدة الحجوم هي $\frac{d\bar{p}}{(2\pi\hbar)^3}$. نصل إلى ذات النتيجة عندما نأخذ الأعداد الكمومية لجسيم في بئر كمون قيماً كبيرة. نكتب $n_i = \frac{d_i}{2\pi}$، $i = x, y, z$ و d_i بعد البئر $dn_i = \frac{d_ik_i}{2\pi}$ و

$$\prod_i dn_i = \frac{V}{(2\pi)^3}\prod_i dk_i = \frac{V}{(2\pi)^3}d\bar{k}$$

نرى من هذه العلاقة أن الأنتروبية

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = \frac{2\pi^2 V T^3}{15(\hbar\langle v\rangle)^3} \qquad (4.12)$$

والطاقة، من العلاقتين السابقتين

$$E = F + TS = N\varepsilon_0 + \frac{V\pi^2 T^4}{10(\hbar\langle v\rangle)^3} \qquad (4.13)$$

ونحصل أخيراً على الحرارة النوعية

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{2}{5}\frac{\pi^2 T^3 V}{(\hbar\langle v\rangle)^3} \qquad (4.14)$$

وهكذا فالحرارة النوعية في درجات الحرارة المنخفضة متناسبة مع T^3. وهذا هو قانون دوباي Debye (1912). لنلاحظ أننا لم نفرق هنا بين الحرارة النوعية في حجم ثابت أو ضغط ثابت لأن الفرق $C_P - C_V$ يتناهى إلى الصفر $C_P - C_V \to 0$ عندما تتناهى درجة الحرارة إلى الصفر بسرعة أكبر من تناهي الحرارة النوعية إلى الصفر : $C = T\frac{\partial S}{\partial T}$ متناسبة مع T^3 بينما تتناسب $C_P - C_V$ المعطاة بالعلاقة (II.(2.(3.10))) $C_P - C_V = \frac{-T\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P^2}{\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T}$ مع T^7 لأن $\frac{\partial V}{\partial P}$ تبقى منتهية عندما $T \to 0$ وحسب (II.(2.(3.6))) $\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right) = -\frac{\partial S}{\partial P}$ وهي إذاً متناسبة مع T^3. ولدينا بصورة عامة عندما تكون الأنتروبية من رتبة T^n فإن $C_P - C_V$ تسعى نحو الصفر برتبة هي $TT^{2n} = T^{2n+1}$.

4.4- درجات الحرارة المرتفعة

لنأخذ نقيض العلاقة (4.8) $T >> \frac{\hbar v}{a}$. يمكن والحال هذه الاقتصار في نشر $e^{-\frac{\hbar\omega}{T}}$ على الحد من الدرجة الأولى وكتابة (4.7) على الشكل

$$F = N\varepsilon_0 + T\sum_\alpha \text{Ln}\frac{\hbar\omega_\alpha}{T} = N\varepsilon_0 - T\sum_\alpha \text{Ln}T + T\sum_\alpha \text{Ln}\hbar\omega_\alpha \qquad (4.15)$$

نعرف تواتراً وسطياً كالمعتاد

$$\text{Ln}\langle\omega\rangle = \frac{1}{3N\nu}\sum_\alpha \text{Ln}\omega_\alpha \qquad (4.16)$$

نستبدل في (4.15) مجموع اللوغاريتمات بهذه القيمة الوسطية ونكتب

$$F = N\varepsilon_0 - 3N\nu T\text{Ln}T + 3N\nu T\text{Ln}\hbar\langle\omega\rangle \qquad (4.15)'$$

نحسب من هذه العلاقة $S = -\frac{\partial F}{\partial T}$ ومن ثم الطاقة

$$E = F + TS = N\varepsilon_0 + 3N\nu T \qquad (4.17)$$

وأخيراً الحرارة النوعية

$$C = 3N\nu \qquad (4.18)$$

ملاحظات :

1- لم نفرق هنا أيضاً بين الحرارة النوعية من أجل ضغط ثابت أو حجم ثابت لأن هذا الفرق ضئيل جداً في حالة الأجسام الصلبة.

2- إن درجة الحرارة المرتفعة تعني أننا انتقلنا من الحالة الكمومية إلى الحالة التقليدية؛ وهذا ما فعلناه عندما كتبنا $e^{-\frac{\hbar\omega}{T}} = 1 - \frac{\hbar\omega}{T}$ إذ نرى أن الطاقة الوسطية للهزاز التوافقي (3.14) هي $T = \langle E \rangle$، حيث أهملنا طاقة الخواء $\frac{\hbar\omega}{2}$ ذات الطابع الكمومي البحت. ونجد التوزع بالتساوي الذي برهناه في الترموديناميك التقليدي : $\frac{1}{2}T$ لكل حد من الدرجة الثانية يدخل في الطاقة إنهما p^2 و q^2 في حالة الهزاز التوافقي والطاقة الوسطية لكل الهزازات هي المعطاة في (4.17).

3- نكتب الحرارة النوعية من أجل جزيء واحد

$$c = 3\nu$$

أي أن الحرارة النوعية من أجل كل ذرة هي $c = 3$ ($3k$ عندما نقيس بوحدات الحرارة) وهذا هو قانون دولونغ وبوتي Dulong et Petit، وهو قانون محقق في درجات الحرارة المعتادة. إنه $3Nk = 3R$ من أجل كل مول أي $25 \frac{\text{جول}}{\text{مول} \times \text{درجة واحدة}}$. يعطي هذا القانون التجريبي لـ c_p في درجة الحرارة $T = 298°K$ القيم التالية :

النحاس	24,5	الزنك	25,4
الفضة	25,5	القصدير	26,4
الرصاص	26,4	الكبريت	22,4

و c_V أصغر بحوالي 5% من هذه القيم.

4- نستطيع الحصول على (4.15) انطلاقاً من التقريب شبه التقليدي بأن نأخذ عدد الحالات المواتية

$$\Gamma = \frac{\Delta q \Delta p}{(2\pi\hbar)^{3N\nu}}$$

حيث $3N\nu$ هو عدد درجات الحرية، وأن نأخذ الطاقة كمجموع الطاقات من الشكل (4.6) ونكتب F، ماعدا الحد $N\varepsilon_0$ على الشكل

$$F = -TLn\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N\nu}}\int e^{-\sum_\alpha \frac{p_\alpha^2+\omega_\alpha^2 q_\alpha^2}{2T}}dqdp$$

حيث dp و dq العناصر التفاضلية من أجل كل القيم α : $dpdq = \prod_\alpha dp_\alpha dq_\alpha$ وهكذا فالتكامل هو جداء $3N\nu$ تكاملاً متطابقاً

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{p_\alpha^2+\omega_\alpha^2 q_\alpha^2}{2T}}dp_\alpha dq_\alpha = \sqrt{2\pi T}\sqrt{\frac{2\pi T}{\omega_\alpha^2}} = \frac{2\pi T}{\omega_\alpha}$$

أخذنا التكامل على q بين $-\infty$ و $+\infty$ لأنه متقارب بسرعة كبيرة؛ لدينا

$$F = -TLn\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N\nu}}\prod_{\alpha=1}^{3N\nu}\left(\frac{2\pi T}{\omega_\alpha}\right)$$

$$= -TLn\prod_\alpha \frac{T}{\hbar\omega_\alpha} = +T\sum_\alpha Ln\frac{\hbar\omega_\alpha}{T}$$

5.4– صيغة تقريب دوباي

استطعنا في الرقمين السابقين حساب المقادير الترموديناميكية بدقة كافية، ذلك أن التواترات الضعيفة هي الوحيدة المستثارة في درجات الحرارة المنخفضة وأننا استطعنا في درجات الحرارة العالية التعبير عن F بواسطة قيمة وسطية للتواترات. أما الآن فسنلجأ إلى معالجة وسيطة تأخذ بعين الاعتبار توزع التواترات بين مختلف درجات الحرية وعددها $3N\nu$ في مجال تواترات يمتد من الصفر إلى قيمة عظمى ω_m $[0, \omega_m]$ وتأخذ في ذات الوقت توزع التواتر (4.9) رغم أنه لا يصلح إلا في درجات الحرارة المنخفضة أي في حال الأمواج الصوتية. نكتب إذاً

$$\int_0^{\omega_m}\frac{3V\omega^2}{2\pi^2\langle v\rangle^3}d\omega = 3N\nu \qquad (4.19)$$

ومنه

$$\omega_m = \langle v\rangle\left(\frac{6\pi^2 N\nu}{V}\right)^{1/3} \qquad (4.20)$$

يطلق على درجة الحرارة $\theta = \hbar\omega_m$ اسم درجة حرارة دوباي أو درجة الحرارة المميزة ونكتب F بأخذ التكامل في (4.10) بين الصفر و ω_m وكتابة المعامل بدليل ω_m المعطاة هنا

$$F = N\varepsilon_0 + \frac{9TN\nu}{\omega_m^3}\int_0^{\omega_m}Ln\left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{T}}\right)\omega^2 d\omega \qquad (4.21)$$

ندخل درجة حرارة دوباي في هذه العلاقة بأن نضع $z = \frac{\hbar\omega}{T}$

$$F = N\varepsilon_0 + 9TN\nu\left(\frac{\theta}{T}\right)^{-3}\int_0^{\frac{\theta}{T}} Ln\left(1 - e^{-z}\right) z^2 dz \qquad (4.22)$$

نكامل بالتجزئة

$$\left[\frac{z^3}{3} Ln\left(1 - e^{-z}\right)\right]_0^{\frac{\theta}{T}} - \int_0^{\frac{\theta}{T}} \frac{z^3}{3}\frac{1}{e^z - 1} dz$$

يطلق على التكامل

$$\frac{3}{x^3}\int_0^x \frac{z^3}{e^z - 1} dz = D(x) \qquad (4.23)$$

اسم دالة دوباي ونكتب F

$$F = N\varepsilon_0 + N\nu T\left[3Ln\left(1 - e^{-\frac{\theta}{T}}\right) - D\left(\frac{\theta}{T}\right)\right] \qquad (4.22)'$$

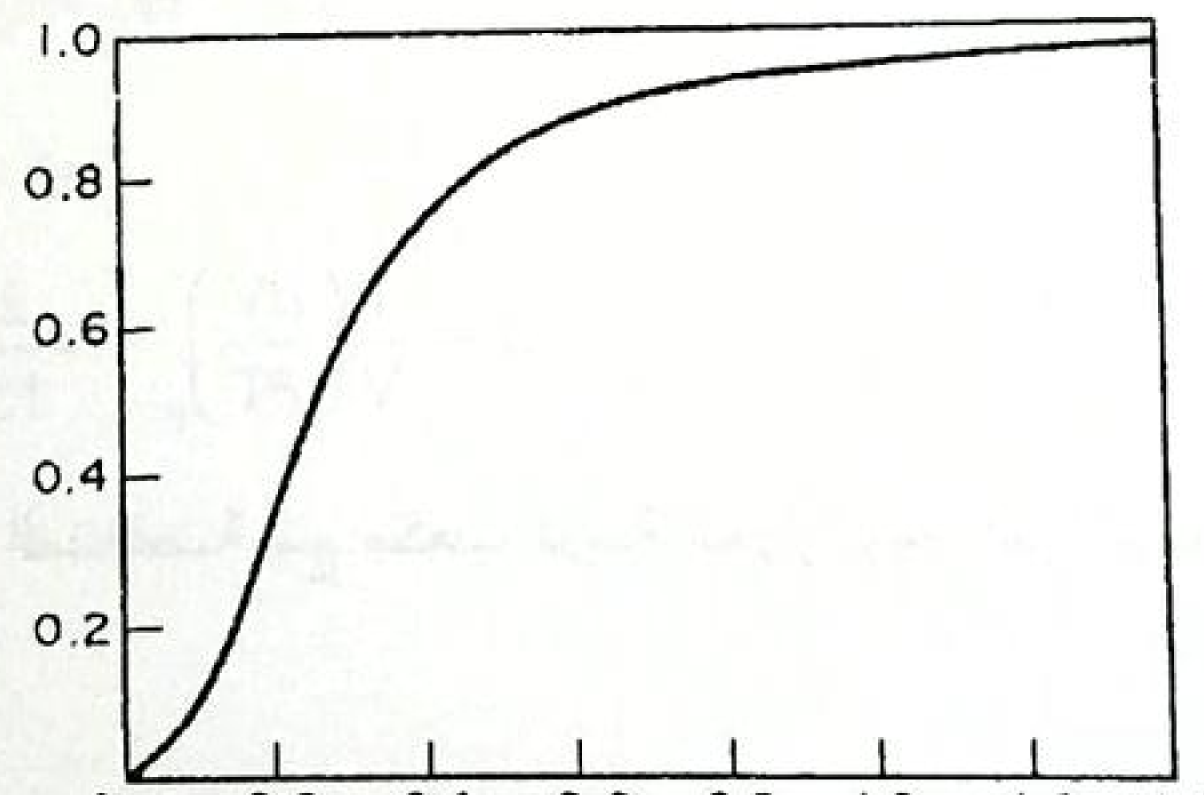
نحصل من هذه العلاقة على الطاقة $E = F - T\frac{\partial F}{\partial T}$ والحرارة النوعية $\frac{\partial E}{\partial T}$:

$$E = N\varepsilon_0 + 3N\nu T\, D\left(\frac{\theta}{T}\right) \qquad (4.24)$$

لأن مشتق الحد بين المعقوفتين في '(4.22) بالنسبة لـ T هو $-\frac{3D}{T}$

$$C = 3N\nu\left[D\left(\frac{\theta}{T}\right) - \frac{\theta}{T}D'\left(\frac{\theta}{T}\right)\right] \qquad (4.25)$$

يبين، الشكل.2، تغيرات C/3Nν بدليل $\frac{T}{\theta}$.



الشكل.2

تستوفي هذه القيم الوسيطة القيم التي وجدناها من أجل درجات الحرارة المنخفضة $T \le \theta$ بحيث نستبدل في التكامل (4.22) $\frac{\theta}{T}$ بـ ∞ لنحصل على (4.10) وما يليها وبشكل خاص على قانون دوباي للحرارة

النوعية. وكذلك تلك التي وجدناها من أجل درجات الحرارة العالية $T >> \theta$ و $x = \frac{\theta}{T} << 1$ و $D(x) = 1$ [9] ومنه قانون دولونغ-بوتي. أما إذا أردنا تحسين هذا القانون فإننا نذهب إلى الحد من الدرجة الثانية بـ x في النشر لنحصل على

$$C = 3N\nu\left[1 - \frac{1}{20}\left(\frac{\theta}{T}\right)^2\right]$$

6.4– تمدد الأجسام الصلبة الحراري

يمكن النظر إلى الحد الثاني في (4.11) كتصحيح للحد $F_0 = N\varepsilon_0$. رأينا (((II.(3.(3.9)) أن $(\delta\phi)_{P,T} = (\delta F)_{V,T}$، لذا فإن الكمون الترموديناميكي ϕ هو

$$\phi = \phi_0(P) - \frac{\pi^2 T^4 V_0(P)}{30(\hbar\langle v\rangle)^3} \qquad (4.26)$$

حيث $\phi_0(P)$ هو الجزء من الكمون المستقل عن درجة الحرارة و $V_0(P)$ هو الحجم المعبر عنه بدليل الضغط P: $P = -\frac{\partial F_0}{\partial V} = -N\frac{d\varepsilon_0}{dV}$ وسرعة الصوت الوسطية $\langle v\rangle$ تابعة للضغط المعرف بهذه العلاقة، $\frac{dP}{d\rho} = v^2$ حيث ρ كثافة المادة. نعلم أن $\phi = F + PV$ وأن $\frac{\partial\phi}{\partial P} = V$. لدينا من (4.26)

$$V = V_0(P) - \frac{\pi^2 T^4}{30\hbar^3}\frac{d}{dP}\left(\frac{V_0}{\langle v\rangle^3}\right) \qquad (4.27)$$

وهكذا فإن معامل التمدد الحراري هو

$$\alpha = \frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P = -\frac{2\pi^2 T^3}{15\hbar^3 V_0}\frac{d}{dP}\left(\frac{V_0}{\langle v\rangle^3}\right) \qquad (4.28)$$

إنه متناسب في درجات الحرارة المنخفضة مع مكعب درجة الحرارة وهو أمر طبيعي لأن S متناسبة مع T^3 ومعها $\frac{\partial V}{\partial T} = -\frac{\partial S}{\partial P}$.

---

[9] نحصل على هذه القيمة بنشر المقدار المكامل $\frac{z^3}{e^z - 1} = z^2 - \frac{z^3}{2} + \frac{z^4}{12}...$ الذي يعطي بالمكاملة $\frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{8} + \frac{x^5}{60}...$ ومنه $D(x) = 1 - \frac{3}{8}x + \frac{1}{20}x^2...$ و $D(x) = 1$ إذا توقفنا عند الحد الأول من النشر – الحد المستقل عن x. أما إذا تابعنا إلى الحد بالدرجة الثانية بـ x فإن $D(x) - xD'(x) = 1 - \frac{1}{20}x^2$.

أما في درجات الحرارة المرتفعة فنجري نفس المحاكمة انطلاقاً من '(4.15) ونكتب

$$\phi = \phi_0(P) - CTLnT + CTLn\hbar\langle\omega\rangle$$

حيث أخذنا قانون دولونغ بوتي بعين الاعتبار $C = 3N\nu$ (4.18).

لدينا

$$V = \frac{\partial\phi}{\partial P} = V_0(P) + \frac{CT}{\langle\omega\rangle}\frac{d\langle\omega\rangle}{dP} \qquad (4.29)$$

ومعامل التمدد الحراري في هذه الحالة هو

$$\alpha = \frac{C}{V_0\langle\omega\rangle}\frac{d\langle\omega\rangle}{dP} \qquad (4.30)$$

إنه مستقل، مثله مثل C، عن درجة الحرارة في حين يتناسب مع C أيضاً في (4.28) لأنها متناسبة مع T^3 في درجات الحرارة المنخفضة.

لنلاحظ أن الذرات تتقارب من بعضها عند ارتفاع الضغط أي أن أطوال الموجة تتناقص ويرتفع التواتر ω $\frac{d\langle\omega\rangle}{dP} > 0$ و $\alpha > 0$. وكذا الأمر في (4.28) ترتفع السرعة الوسطية $\langle v\rangle$ $\frac{d\langle v\rangle}{dP} > 0$ و $\frac{d}{dP}\frac{1}{\langle v\rangle^3} = -\frac{3}{\langle v\rangle^4}\frac{d\langle v\rangle}{dP} < 0$.

لنطبق أخيراً مبدأ الحالات المتقابلة (II.4.§1.5) على صيغة دوباي (4.25) التي تبين أن الحرارة النوعية هي دالة عامة بالمتغير $\frac{\theta}{T}$ تصح على كل الأجسام الصلبة التي لها نفس المتغير $\frac{\theta}{T}$، θ مختلفة من جسم إلى آخر بطبيعة الحال[10] ! يتيح لنا هذا المبدأ النظر إلى الكمون الترموديناميكي كدالة من الشكل

$$\phi = \phi_0(P) + \theta f\left(\frac{T}{\theta}\right) \qquad (4.31)$$

والحجم هو

$$V = V_0(P) + \frac{d\theta}{dP}\left(f - \frac{T}{\theta}f'\right)$$

ومعامل التمدد

$$\alpha = -\frac{T}{V_0\theta^2}\frac{d\theta}{dP}f''$$

نحسب الحرارة النوعية انطلاقاً من الانتالبية $H = \phi - \frac{\partial\phi}{\partial T}$ و $C = \frac{\partial H}{\partial T}$

$$C = -\frac{T}{\theta}f''$$

[10] إنها تساوي °90 من أجل الرصاص، °210 للفضة، °400 للألمنيوم وتصل إلى °2000 من أجل الألماس.

ومنه العلاقة بين هذين المقدارين

$$\frac{\alpha}{C} = \frac{1}{\theta V_0(P)}\frac{d\theta}{dP} \qquad (4.32)$$

وهي نسبة مستقلة عن درجة الحرارة بشرط بقاء مبدأ الحالات المتقابلة ساري المفعول.

ملحق الفصل الأول

1. الدالة غاما Γ (أولر)

تعرف هذه الدالة في المستوى العقدي z من أجل $\operatorname{Re} z > 0$ بالتكامل التالي

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt \qquad \operatorname{Re} z > 0 \tag{1}$$

وهو تكامل متقارب إطلاقاً في نصف المستوى العقدي $\operatorname{Re} z > 0$. يمكن تمديد هذه الدالة تحليلياً كدالة ميرومورفية meromorphic[1] على مجموعة الأعداد العقدية ماعدا الأعداد الصحيحة السالبة : 0، -1، -2، -3... المكونة لأقطاب هذه الدالة. يبين التكامل بالتجزئة لهذا التعريف أن

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z) \tag{2}$$

تعطي هذه العلاقة، عندما نقتصر على الأعداد الصحيحة الموجبة، بالتكرار

$$\Gamma(n+1) = n! \tag{3}$$

$$\Gamma(1) = 1$$

لنحسب Γ من أجل مختلف القيم نصف الصحيحة. لدينا

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \int_0^\infty t^{-\frac{1}{2}} e^{-t} dt = 2\int_0^\infty e^{-u^2} du = 2 \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2} = \sqrt{\pi} \tag{4}$$

حيث انتقلنا من المتغير t إلى المتغير $u = \sqrt{t}$. وباستعمال العلاقة (2) نجد من

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi} \quad \text{أن} \quad \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}،\ \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{3}{4}\sqrt{\pi}\text{، الخ} \tag{5}$$

تحقق الدالة Γ الصيغة التالية المعروفة باسم صيغة الانعكاس لأولر

$$\Gamma(1-z)\Gamma(z) = \frac{\pi}{\sin(\pi z)} \tag{6}$$

التي تريناً أيضاً أن $\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$.

نحصل بالتكرار معممين (5) من أجل n زوجية على الصيغة

$$\Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right) = \left(n-\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(n-\frac{1}{2}\right) = \left(n-\frac{1}{2}\right)\left(n-\frac{3}{2}\right)\cdots\frac{3}{2}\cdot\frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \tag{7}$$

---

[1] يمكن للدالات التحليلية أن تكون كاملة الشكل holomorphic، لها أصفار فقط، أو مجزأة الشكل، لها أصفار وأقطاب (تأخذ قيماً لامنتهية فيها) meromorphic.

ملحق الفصل الأول

1. الدالة غاما Γ (أولر)

تعرف هذه الدالة في المستوى العقدي z من أجل $\operatorname{Re} z > 0$ بالتكامل التالي

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1}e^{-t}dt \qquad \operatorname{Re} z > 0 \tag{1}$$

وهو تكامل متقارب إطلاقاً في نصف المستوى العقدي $\operatorname{Re} z > 0$. يمكن تمديد هذه الدالة تحليلياً كدالة ميرومورفية meromorphic[1] على مجموعة الأعداد العقدية ماعدا الأعداد الصحيحة السالبة : 0، -1، -2، -3... المكونة لأقطاب هذه الدالة. يبين التكامل بالتجزئة لهذا التعريف أن

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z) \tag{2}$$

تعطي هذه العلاقة، عندما نقتصر على الأعداد الصحيحة الموجبة، بالتكرار

$$\Gamma(n+1) = n! \tag{3}$$

$$\Gamma(1) = 1$$

لنحسب Γ من أجل مختلف القيم نصف الصحيحة. لدينا

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \int_0^\infty t^{-\frac{1}{2}}e^{-t}dt = 2\int_0^\infty e^{-u^2}du = 2 \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2} = \sqrt{\pi} \tag{4}$$

حيث انتقلنا من المتغير t إلى المتغير $u = \sqrt{t}$. وباستعمال العلاقة (2) نجد من

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi} \quad \text{أن} \quad \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \ \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{3}{4}\sqrt{\pi}, \ \text{الخ} \tag{5}$$

تحقق الدالة Γ الصيغة التالية المعروفة باسم صيغة الانعكاس لأولر

$$\Gamma(1-z)\Gamma(z) = \frac{\pi}{\sin(\pi z)} \tag{6}$$

التي ترينا أيضاً أن $\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$.

نحصل بالتكرار معممين (5) من أجل n زوجية على الصيغة

$$\Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right) = \left(n-\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(n-\frac{1}{2}\right) = \left(n-\frac{1}{2}\right)\left(n-\frac{3}{2}\right)\cdots\frac{3}{2}\cdot\frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \tag{7}$$

---

[1] يمكن للدالات التحليلية أن تكون كاملة الشكل holomorphic، لها أصفار فقط، أو مجزأة الشكل، لها أصفار وأقطاب (تأخذ قيماً لامنتهية فيها) meromorphic.

تسمح لنا هذه العلاقة والعلاقة (3) بحساب التكاملات التالية

$$I_n = \int_0^{\infty} e^{-\alpha x^2} x^n dx$$

نضع $\alpha x^2 = y$ فنحصل على

$$I_n = \frac{1}{2}\alpha^{-\frac{n+1}{2}} \int_0^{\infty} e^{-y} y^{\frac{n-1}{2}} dy = \frac{1}{2}\alpha^{-\frac{n+1}{2}} \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right) \quad (8)$$

فإن كان n زوجياً، $n = 2r$، $r > 0$ تأخذ Γ في (8) الشكل $\Gamma\left(r + \frac{1}{2}\right)$، وحسب (7) فإن

$$I_{2r} = \frac{(2r-1)!!}{2^{r+1}} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^{2r+1}}} \quad (9)$$

حيث $(2r-1)!!$ تعريفاً هو : $(2r-1)(2r-3)...3 \cdot 1$.

أما إذا كان n فردياً، $n = 2r + 1$، فنحصل من (8) و(3) حيث نتخلص من القوة $\frac{1}{2}$ في المعامل $\frac{1}{\frac{1}{2}\alpha^{\frac{n+1}{2}}}$، على

$$I_{2r+1} = \frac{r!}{2\,\alpha^{r+1}} \quad (10)$$

لنلاحظ أننا عندما ننتقل من التكامل على المجال $[0, \infty]$ إلى التكامل على المجال $[-\infty, +\infty]$ تنعدم التكاملات الفردية بينما يصبح مقدار التكامل ضعف قيمته الأولى في التكاملات الزوجية.

2. أعداد برنوللي Bernoulli

تدخل هذه الأعداد في حساب دالة ريمان Zeta التي سنتعرض لها بعد قليل. منشؤها هو حساب مجموع الأعداد الطبيعية $1 + 2 + ... + n$، المتناسب مع n^2، ومجموع مربعاتها $1^2 + 2^2 + ... + n^2$ المتناسب مع n^3 ومكعباتها (وقد حسبه الكـرجي في أواخر القرن العاشر) المتناسب مع n^4، الخ. نكتب كثير الحدود من الدرجة n التالي

$$S_m(n) = 0^m + 1^m + 2^m + ... + (n-1)^m = \sum_{k=0}^{n-1} k^m$$

بدليل معاملات ثنائي الحد وأعداد برنوللي :

$$S_m(n) = \sum_{k=0}^{n-1} k^m = \frac{1}{m+1}\sum_{k=0}^{m} \binom{m+1}{k} B_k n^{m+1-k} \quad (11)$$

وبصورة أعم ننشر الدالة $\frac{t}{e^t - 1}$ كسلسلة بـ $\frac{t^n}{n!}$ أمثالها هي أعداد برنوللي

$$f(t) = \frac{t}{e^t - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n \frac{t^n}{n!} \quad (12)$$

وبما أن الدالة $f(t)$ زوجية "تقريباً" بمعنى أن $f(t) - f(-t) = -t$ مهمل أما الحدود الأخرى في النشر فإن

$$B_{2n+1} = 0 \tag{13}$$

أما أعداد برنولي الزوجية فتأخذ القيم التالية

$$B_0 = 1 ، B_1 = -\frac{1}{2} ، B_2 = \frac{1}{6} ، B_4 = -\frac{1}{30} ، B_6 = \frac{1}{42} ، \dots B_{12} = -\frac{691}{2730} \tag{14}$$

3. الدالة زيتا ζ (ريمان)

تعرف هذه الدالة بالسلسلة التالية

$$\zeta(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^z} = 1 + \frac{1}{2^z} + \frac{1}{3^z} + \frac{1}{4^z} \dots \tag{15}$$

من أجل $\mathrm{Re}\, z > 1$ وهي سلسلة متباعدة من أجل $z = 1$.

يمكن كتابة هذه السلسلة بدليل الدالة إيتا η لديريكلي Dirichlet

$$\eta(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n^z}$$

$$\zeta(z) = \frac{\eta(z)}{1 - 2^{1-z}} \tag{15)'}$$

وهي دالة تحليلية عقدية ميرمورفية، لها أصفار وأقطاب، يفترض ريمان أن القسم الحقيقي لكل أصفارها غير التافهة يساوي $\frac{1}{2}$، وهي فرضية لم تبرهن بعد.

إن ما يهمنا في الفيزياء الإحصائية هو حساب تكاملات من الشكل

$$\int_0^{\infty} \frac{t^{z-1}dt}{e^t \pm 1} = \int_0^{\infty} t^{z-1} e^{-t} \sum_{n=0}^{\infty} (\mp)^n e^{-nt} dt$$

نكتب هذه التكاملات بدليل الدالة ζ والدالة Γ

$$\zeta(z) = \frac{1}{(1 - 2^{1-z})\Gamma(z)} \int_0^{\infty} \frac{t^{z-1}}{e^t + 1} dt \tag{16}$$

$$\zeta(z) = \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^{\infty} \frac{t^{z-1}}{e^t - 1} dt \tag{17}$$

يمكن النظر إلى هاتين العلاقتين كتعريف آخر للدالة ζ.

تحقق الدالة ζ المعادلة الدالتية التالية

$$\zeta(z) = 2^z \pi^{z-1} \sin\left(\frac{\pi z}{2}\right) \Gamma(1 - z) \zeta(1 - z) \tag{18}$$

الصالحة من أجل كل الأعداد العقدية ماعدا $z = 0$ و $z = 1$، والمكافئة بالانتقال من المتغير z إلى $z' = 1 - z$ لـ

$$\zeta(1-z) = \frac{2}{2\pi^z}\cos\left(\frac{\pi z}{2}\right)\Gamma(z)\zeta(z) \qquad (18)'$$

يبرهن أنه في حال $z \in \mathbb{C} - \mathbb{Z}$ حيث $\mathbb{Z}$ مجموعة الأعداد الطبيعية

$$\pi \cot g\pi z = \frac{1}{z} + \sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{1}{z+n} + \frac{1}{z-n}\right) \qquad (1)$$

$$= \frac{1}{z} + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{2z}{z^2 - n^2} = \frac{1}{z} - \sum_{n=1}^{\infty}2z\sum_{k=0}^{\infty}\frac{z^{2k}}{n^{2k+2}} \qquad (2)$$

حيث الحد الأخير هو نشر $\frac{1}{n^2\left(1 - \frac{z^2}{n^2}\right)}$. نقوم بتبديل المتغير k بأن نضع $k + 1 = K$ ليأخذ الحد الأخير الشكل $z\sum_{k=0}\frac{z^{2k}}{n^{2k+2}}$

$$z^{2K-1}\zeta(2K) = \sum_{K=1}\frac{z^{2K-1}}{n^{2K}} \qquad (3)$$

ومن جهة أخرى فإن

$$\pi \text{cotg}\pi z = i\pi + \frac{2i\pi}{e^{2i\pi z} - 1} = i\pi + \frac{1}{z}\sum_{n=0}^{\infty}B_n\frac{(2i\pi z)^n}{n!}$$

حيث استعملنا علاقة التعريف (12). نحصل بمقارنة هذه العلاقة مع (2) حيث الحد الأخير هو (3) وحيث يعطي الحد صفر في النشر $\frac{1}{z}$ لأن $B_0 = 1$ على

$$\zeta(2K) = -\frac{1}{2}B_{2K}\frac{(2i\pi)^{2K}}{(2K)!} = \frac{(-1)^{K-1}\pi^{2K}2^{2K-1}}{(2K)!}B_{2K} \qquad (19)$$

لأن $B_{2K+1} = 0$.

ومن جهة ثانية فإن $\zeta(2K) > 0$ من أجل $K > 0$ أي أن $|B_{2K}| = (-1)^{K-1}B_{2K}$

و

$$\zeta(2K) = \frac{2^{2K-1}\pi^{2K}|B_{2K}|}{(2K)!} \qquad (19)'$$

لدينا

$$\zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}\text{، }\zeta(4) = \frac{\pi^4}{90}\text{، }\zeta(6) = \frac{\pi^6}{945}\text{، }\zeta(8) = \frac{\pi^8}{9450} \qquad (19)''$$

نضع هذه العلاقة في (16) مع ملاحظة أن $\Gamma(2K) = (2K-1)!$ فنجد

$$\zeta(2K)\left(1 - \frac{1}{2^{2K-1}}\right)(2K-1)! = \int_0^{\infty}\frac{t^{2K-1}}{e^t + 1}dt = \frac{2^{2K-1} - 1}{2K}\pi^{2K}|B_{2K}| \qquad (20)$$

ترينا المعادلة الدالتية أن الأعداد الصحيحة السالبة والزوجية تعدم $\zeta(z)$ وتشكل أصفاراً تافهة لـ ζ

$\zeta(-2) = \zeta(-4)... = 0$.

أما من أجل الأعداد الصحيحة السالبة والفردية فإن

$\zeta(-n) = (-1)^n \frac{B_n + 1}{n+1} \in Q$ حيث Q مجموعة الأعداد المنطّقة.

أو بوضع $n = -(2k-1)$

$$\zeta(-n) = -\frac{B_{2k}}{2k}$$

$$\zeta(-1) = -\frac{1}{12} \text{، } \zeta(-3) = \frac{1}{120} \text{، } \zeta(-5) = -\frac{1}{252} \text{، } \zeta(0) = B_1 = -\frac{1}{2}$$

هذا في حين

$\zeta(-2k) = 0$ لأن $B_{2k+1} = 0$ كما رأينا

لدينا من (17) و '(19) من أجل z عدد صحيح زوجي

$$\int_0^{\infty} \frac{t^{2n-1}}{e^t - 1} dt = \frac{(2\pi)^{2n} |B_{2n}|}{4n} \qquad (21)$$

حيث وضعنا $\Gamma(2n) = (2n-1)!$.

أما القيم الأخرى لـ ζ فتحسب مُعطيةً

$$\zeta\left(\frac{3}{2}\right) = 2,612 \text{، } \zeta\left(\frac{5}{2}\right) = 1,341 \text{، } \zeta(3) = 1,202 \text{، } \zeta(5) = 1,037 \qquad (22)$$

نرى من (21) و (14)، بوضع $2n = 4$ على سبيل المثال، أن

$$\int_0^{\infty} \frac{t^3}{e^t - 1} dt = \frac{(2\pi)^4}{8} \frac{1}{30} = \frac{\pi^4}{15} \qquad (23)$$

الفصل الثاني

التوزع القانوني الكبير

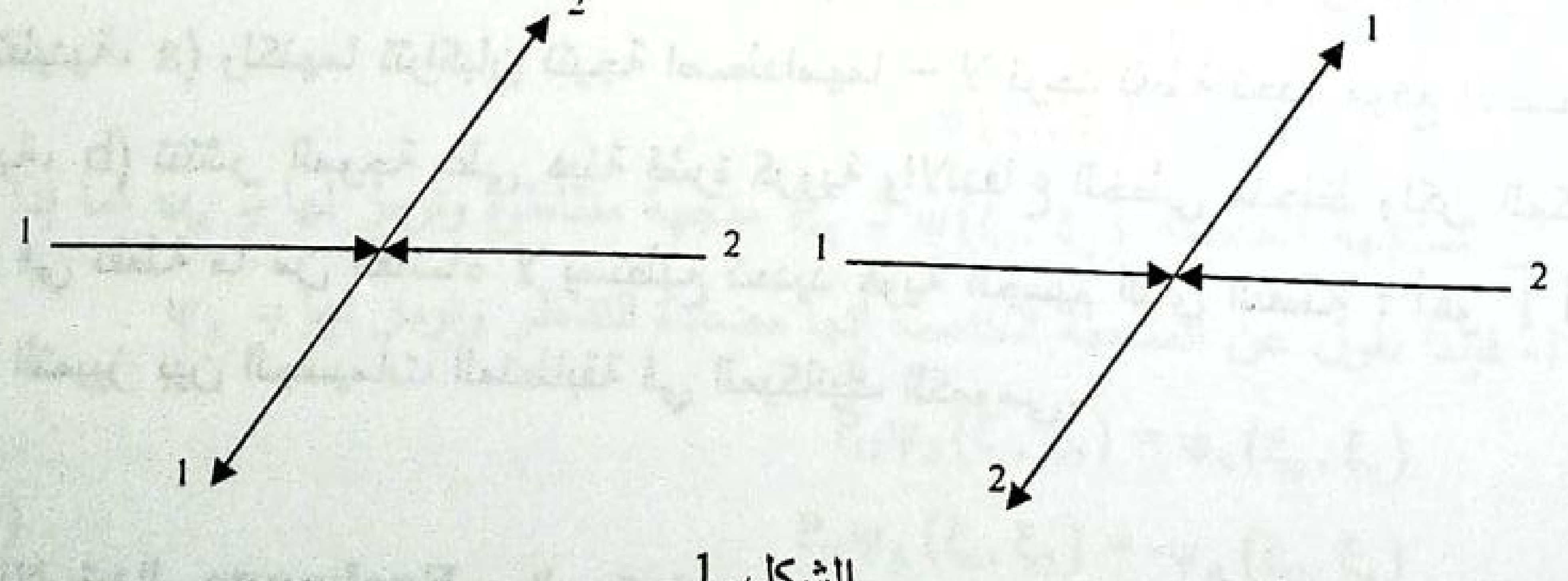
1- الفيرميونات والبوزونات 51
2- التوزع القانوني الكبير........................ 56
3- خواص الغاز في جوار الصفر المطلق 69
4- الغاز الإلكتروني في المعادن 87

الفصل الثاني: التوزع القانوني الكبير

1. الفيرميونات والبوزونات

1.1– الجسيمات المتطابقة ومبدأ عدم التمييز

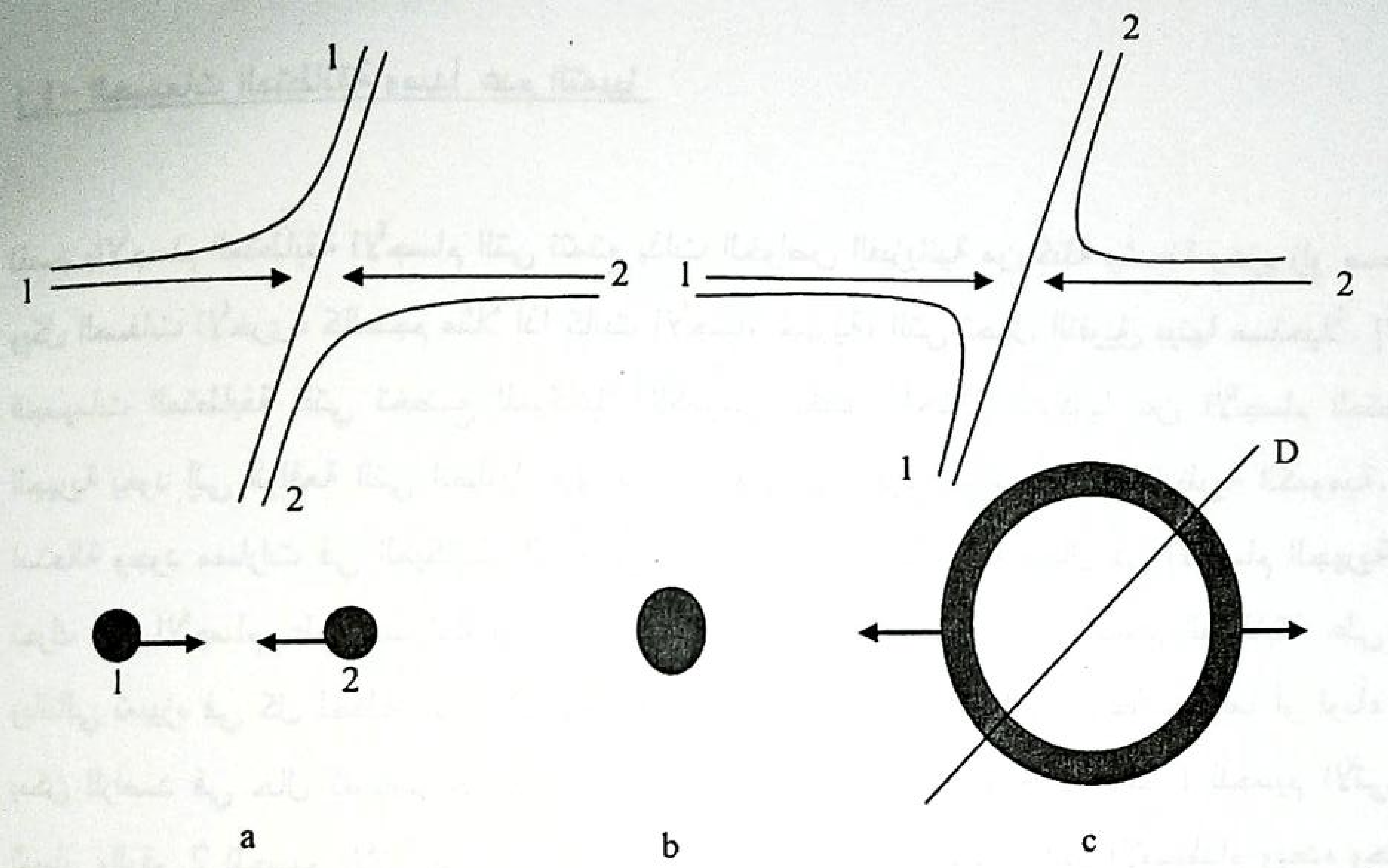
نقصد بالأجسام المتطابقة الأجسام التي تتمتع بذات الخواص الفيزيائية من كتلة وشحنة وعزم زاوٍ صميمي وبكل الصفات الأخرى، كالحجم مثلاً إذا كانت الأجسام جهرية، التي تجعل التفريق بينها مستحيلاً. إلا أن الجسيمات المتطابقة التي تخضع للميكانيك الكمومي تختلف اختلافاً جوهرياً عن الأجسام المتطابقة الجهرية يعود إلى الواقعة التي انطلقنا منها في مطلع المجلد الرابع لوضع لبنات النظرية الكمومية. إنها استحالة وجود مسارات في الميكانيك الكمومي على خلاف ما هو عليه الحال في الأجسام الجهرية. إن تحرك هذه الأجسام على مسارات يتيح للراصد تتبع حركة كل جسم من الأجسام المتطابقة على حده وبالتالي تمييزه في كل لحظة عن الأجسام الأخرى المتمتعة بنفس الخواص بإعطائه رقماً أو لوناً، الخ. يمكن للراصد في حال تصادم جسمين متطابقين على سبيل المثال إعطاء الرقم 1 للجسيم الآتي من اليسار والرقم 2 للجسيم الآتي من اليمين وتتبع حركة كل من الجسيمين قبل الاصطدام وبعده وحساب الانعطاف في الاصطدام المرن في مقرن مركز الكتلة أو مقرن المختبر كما رأينا(I.4§4.3) يمكن أن ينتج عن الاصطدام أحد الشكلين التاليين الرصودين اللذين يحققان العلاقة $\vec{P}_1 + \vec{P}_2 = \vec{P}'_1 + \vec{P}'_2$ حيث رمزنا بـ $\vec{P}$ إلى الاندفاع الخطي قبل الاصطدام وبـ $\vec{P}'$ إلى قيمته بعد الاصطدام، الشكل.1



الشكل.1

إنهما رصودان لأننا نستطيع فعلاً تتبع حركة كل من الجسيمين لحظة بلحظة : لم يفقد الجسمان نتيجة اصطداهما هويتهما – الرقم أو اللون الذي يميزهما –، يستطيع كل لاعب كُلة جمع كلاته بسهولة في نهاية اللعبة رغم تطابق الكلات.

أما الجسيمان المتصادمان في الميكانيك الكمومي – حيث عبرنا، بمبدأ اللاتحديد، عن استحالة وجود المسار، عن استحالة وجود شروط بدائية، وعن إعطاء الجسيم طابعاً موجياً – فهما في واقع الأمر باقتا موجة يمكن ترقيمهما كما في حال الأجسام الجهرية لكنهما لا تلبثا أن تتراكبا أثناء الاصطدام لتشكلا دالة موجية على هيئة قشرة كروية تتسع مع الزمن، الشكل.2



الشكل.2

تتجه باقتا الجسيمين المتطابقين الواحدة نحو الأخرى في مقرن الكتلة وهما معينتان بالرقمين 1 و 2 كما في الحالة التقليدية، a) ولكنهما تتراكبان نتيجة اصطدامهما – لا توجد نقطة تحدد موقع الاصطدام خلافاً للحالة التقليدية، b) تنتشر الموجة على هيئة قشرة كروية والاندفاع الخطي منحفظ ولكن المكشاف D، c) الموضوع في نقطة ما من الفضاء لا يستطيع تحديد هوية الجسيم الذي التقطه : أهو 1 أم 2. وهذا هو مبدأ عدم التمييز بين الجسيمات المتطابقة في الميكانيك الكمومي.

2.1– مؤثر الاستبدال Exchange – المستبدل

لنرمز، كي لا نعقد الكتابة إلى العناصر التي تعين حالة الجسيم بالرمز ξ الذي يتضمن على سبيل المثال وضعه ومسقط سبينه على محور ما وإلى دالة الموجة لجسيمين (وهي في الواقع الجداء التانسوري لمتجهتي حالة) بالرمز $\psi(\xi_1, \xi_2)$ أي أن

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = |\psi_1(\xi_1)\rangle|\psi_2(\xi_2)\rangle \qquad (1.1)$$

نرمز أخيراً للمؤثر الذي يبادل متجهتي الحالة، أي الذي يتيح للجسيمين المتطابقين تبادل هويتهما (الوضع والسبين هنا) بالرمز P_{12} ونسميه مؤثر الاستبدال أو المستبدل :

$$P_{12}\psi(\xi_1, \xi_2) = \psi(\xi_2, \xi_1) = |\psi_1(\xi_2)\rangle|\psi_2(\xi_1)\rangle \qquad (1.2)$$

تظهر علاقة التعريف هذه أن تطبيق المؤثر مرتين يعيد إلى الحالة البدائية أي أن

$$P_{12}^2 = I \qquad (1.3)$$

أو

$$P_{12}^{-1} = P_{12} \qquad (1.3)'$$

لنفترض من جهة أخرى أن دالات الموجة $\psi(\xi_1, \xi_2)$ منظمة للواحد أي أن

$$\left(\langle\psi_1(\xi_1)|\langle\psi_2(\xi_2)|\right)|\psi_1(\xi_1)\rangle|\psi_2(\xi_2)\rangle = 1$$

وبالتالي فإن

$$\left(\langle\psi_1(\xi_1)|\langle\psi_2(\xi_2)|P_{12}\right)P_{12}|\psi_1(\xi_1)\rangle|\psi_2(\xi_2)\rangle = 1$$

ومنه

$$P_{12}^{\dagger}P_{12} = 1 \qquad (1.3)''$$

أي أن $P_{12}^{\dagger} = P_{12}^{-1}$ و P_{12} واحدي، وذاتي الترافق. قيمه الخاصة أعداد قيمتها المطلقة تساوي 1 أي أنها من الشكل $e^{i\alpha}$:

<u>قضية 1</u> :

إن مبادلة الهوية بين جسيمين متطابقين هو ضرب دالة الموجة للجسيمين بعامل طور $e^{i\alpha}$.

$$\psi(\xi_2, \xi_1) = e^{i\alpha}\psi(\xi_1, \xi_2)$$

فإذا كان الطور $e^{i\alpha}$ يساوي 1 فإن

$$\psi(\xi_2, \xi_1) = \psi(\xi_1, \xi_2)$$

ونقول عندئذ إن المتجهة الخاصة $\psi(\xi_1, \xi_2)$ لـ P_{12} متجهة متناظرة ونرمز لها بـ ψ_S أما إذا كان الطور $e^{i\alpha}$ يساوي 1- فإننا نقول عن المتجهة الخاصة إنها مضادة التناظر ونرمز لها بـ ψ_A

$$P_{12}\psi_S(\xi_1, \xi_2) = \psi_S(\xi_2, \xi_1)$$

$$P_{12}\psi_A(\xi_1, \xi_2) = -\psi_A(\xi_2, \xi_1) \qquad (1.4)$$

انطلقنا في تعريفنا للمنظر Symmetrizer والمنظر المضاد Antisymmetrizer في الفضاء الهيلبرتي $\mathcal{H}^{\otimes 2}$ من ملاحظتنا أنه من الممكن الحصول من دالة بمتغيرين $f(x_1, x_2)$ على دالة متناظرة أو مضادة التناظر من الشكل $f(x_1, x_2) \pm f(x_2, x_1)$ وكتبنا المؤثرين المنظر S والمنظر المضاد A على الشكل

$$S = \frac{1}{2}(I + P_{12}) \qquad (1.5)_S$$

$$A = \frac{1}{2}(I - P_{12}) \qquad (1.5)_A$$

إن $[S, A] = 0$. وجدنا أن $S + A = I$ أي أن الفضاء من الرتبة الثانية لفضائين هيلبرتيين هو مجموع مباشر لمتجهات متناظرة ومتجهات مضادة التناظر.

أو بعبارة أخرى لا يمكن لدالة موجة لجسيمين إلا أن تكون متناظرة أو مضادة التناظر؛ هذا يعني أن دالات موجة الجسيمات الكمومية والأولية منها بشكل خاص لا يمكن أن تنتمي إلا إلى أحد هذين النوعين من الدالات المتناظرة أو مضادة التناظر : إن انتماء زوج منها إلى أحد النوعين يعني انتماء كل الأزواج إلى ذات النوع، وهكذا فإن الفضاء الذي ينتمي إليه n جسيماً هو فضاء جزئي من $\mathscr{H}^{\otimes n}$، الجداء التانسوري لـ n فضاء هيلبرتياً، مسقَط مؤثر التناظر الذي سنعرفه في هذا الفضاء ونرمز له بـ S، أو مسقط مؤثر التناظر المضاد الذي سنرمز له بـ A. مع الإشارة منذ الآن أن مجموع المسقِطين $S + A$ في $\mathscr{H}^{\otimes n}$ لا يساوي المؤثر الواحدي وبالتالي أن $S + A = I$ غير محققة في $\mathscr{H}^{\otimes n}$: توجد في هذا الفضاء دالات ليست بالمتناظرة وليست بمضادة التناظر ولا تمثل والحال هذه جسيمات كمومية.

3.1– البوزونات والفيرميونات

يطلق على الجسيمات المتطابقة التي تنتمي دالاتها إلى $S\mathscr{H}^{\otimes 2}$ (وبصورة أعم إلى $S\mathscr{H}^{\otimes n}$) اسم بوزونات، وعلى تلك التي تنتمي دالاتها إلى $A\mathscr{H}^{\otimes 2}$ (وبصورة أعم إلى $A\mathscr{H}^{\otimes n}$) اسم فيرميونات.

منشأ هذه التسمية الإحصاء الكمومي الذي سندرسه بعد قليل، لأنه من الممكن وجود بوزونين في نفس الحالة الكمومية $\xi_1 = \xi_2$ بينما يستحيل ذلك من أجل فيرميونين لأن $\psi_A(\xi_1, \xi_2) = -\psi_A(\xi_2, \xi_1)$ حسب (1.4) وبالتالي فإن دالة الموجة لفيرميونين متمتعين بنفس الهوية، وبنفس الحالة الكمومية : $\xi_1 = \xi_2$، منعدمة

$$\psi_A(\xi_1, \xi_2) = -\psi_A(\xi_2, \xi_1) = 0 \qquad (1.6)$$

تعبر العلاقة (1.6) التي استنبطناها من كون دالة الموجة لفيرميونين مضادة التناظر عما يعرف باسم مبدأ الاستبعاد Exclusion لباولي : يستحيل وجود فيرميونين متطابقين في نفس الحالة الكمومية – في نفس المكان ونفس مسقط السبين على اتجاه ما على سبيل المثال.

وهكذا فإنه من الممكن إحصائياً وجود أي عدد نريد من البوزونات في نفس الحالة الكمومية. يعرف هذا الإحصاء باسم إحصاء بوز – آنشتاين الذي اقترحه بوز للدراسة الإحصائية للفوتونات والذي عممه آنشتاين إلى جسيمات أخرى (1924). بينما لا يمكن إحصائياً وضع سوى فيرميونين في موضع واحد شريطة أن يكون مسقط سبينهما مختلفاً : إن العدد 2 هو أكبر عدد ممكن لوجود الفيرميونات في حالة

معينة – ذات الوضع ومسقط سبين مختلف. يعرف هذا الإحصاء باسم إحصاء فيرمي-ديراك الذي اقترحه فيرمي للدراسة الإحصائية للإلكترونات والذي فسره ديراك في نفس الوقت تقريباً (1926).

لنلح من جديد على الصلة الوثيقة بين الإحصاء، بين التناظر وتضاد التناظر، وبين السبين : إن سبين البوزون عدد صحيح في حين سبين الفيرميون عدد نصف صحيح. إذ يتم تكميم مؤثرات خلق وفناء البوزونات بعلاقة مبادلة عادية $[A, B]_- = AB - BA$ (IV.(6.(2.11)))؛ في حين تكمم المؤثرات المقابلة لها في حالة الفيرميونات بعلاقة مبادلة مضادة $[A, B]_+ = AB + BA$ (IV.(6.(2.22))) وتبين نظرية الحقول المكممة أن التكميم على هذا النحو شرط ضروري لكي تكون طاقة الفيرميون موجبة. وهكذا تنقسم المادة إلى نوعين مختلفين تماماً هما النوع البوزوني والنوع الفيرميوني، ولم تستطع الفيزياء، حتى الآن إرجاع هذين النوعين إلى منشأ واحد[1].

4.1– الفضاء متعدد الجسيمات

اعتمدنا في الفصل السادس من كتاب الميكانيك الكمومي على زمرة التبديلات (Permutations) ζ_n لـ n شيئاً والتي عدد عناصرها !n لتعميم مفهومي المنظر والمنظر المضاد في ζ_n

$$S = \frac{1}{n!}\sum_{\alpha\in n!}\tau_\alpha \qquad (1.7)_S$$

$$A = \frac{1}{n!}\sum_{\alpha\in n!}\varepsilon(\alpha)\tau_\alpha \qquad (1.7)_A$$

حيث $\varepsilon(\alpha)$ هو توقيع التبديل.

لنذكر أننا نمثل كل تبديل $\tau \in \zeta_n$ بمصفوفة $M(\tau)$:

$$\begin{pmatrix}\tau(1)\\ \vdots \\ \tau(n)\end{pmatrix} = M(\tau)\begin{pmatrix}1\\ \vdots \\ n\end{pmatrix}$$

عناصر العمود i في هذه المصفوفة هي $\tau(i) = M_{ki}k$ وهي عناصر معدومة كلها ماعدا عنصر السطر j حيث $\tau(i) = j$ والتي تساوي 1 وهكذا فإن معين M يساوي ±1 وهو توقيع التبديل.

قابلنا في الجداء التانسوري $\mathscr{H}^{\otimes n}$ المؤثر τ_α بـ P_α وكتبناه، على غرار كتابتنا لـ τ_α على شكل جداء مناقلات، على شكل جداء مؤثرات الاستبدال الواحدية وذاتية الترافق $P_{k\ell}$ التي تعمم P_{12}، $k, \ell \in [1, n]$. ولدينا في الفضاء $\mathscr{H}^{\otimes n}$

---

[1] تفترض نظرية فائقية التناظر Supersymmetry – وهي نظرية رياضية تنطبق على كل الحقول المكممة وترتكز على جبر مدرج graduate يقبل المبادل والمبادل المضاد في آن واحد – وجود مرافق فائق فيرميوني لكل جسيم أولي بوزوني، وبالمقابل وجود مرافق فائق بوزوني لكل جسيم أولي فيرميوني ولكنه لم يعثر بعد، رغم مرور ما ينوف عن ثلاثة عقود على نشوء هذه النظرية، على أي من هذه المرافقات الفائقة.

$$S = \frac{1}{n!}\sum_{\alpha\in n!} P_\alpha \qquad (1.7)'_S$$

$$A = \frac{1}{n!}\sum_{\alpha\in n!} \varepsilon(\alpha) P_\alpha \qquad (1.7)'_A$$

ولاحظنا أن $S + A \neq I$، أي أن $\mathcal{H}^{\otimes n}$ يحتوي على متجهات حالة لـ n جسيماً ليست زوجية ولا فردية : لا تمثل n بوزوناً أو n فيرميوناً.

نعبر عن مبدأ عدم التمييز بالقول إن الهاميلتوني صامد أمام استبدال الجسيمين ℓ و k مثلاً، أي إن

$$[P_{k\ell}, H] = 0 \qquad (1.8)$$

من أجل كل الأزواج ℓ، k.

كتبنا أخيراً متجهات حالة n بوزوناً في $S\mathcal{H}^{\otimes n}$ أو n فيرميوناً في $A\mathcal{H}^{\otimes n}$ على شكل مستديم أو معين (يعرف باسم معين سلاتر) (((IV.(6.(1.17)

$$|\Psi\rangle_{\substack{A\\S}} = \begin{vmatrix} \psi_1(\xi_1) & \psi_1(\xi_2) & \dots & \psi_1(\xi_n) \\ \psi_2(\xi_1) & \psi_2(\xi_2) & \dots & \psi_2(\xi_n) \\ \vdots & & & \\ \psi_n(\xi_1) & \psi_n(\xi_2) & \dots & \psi_n(\xi_n) \end{vmatrix}_{\mp} \qquad (1.9)$$

إن المعين أو المستديم الذي نحصل عليه، وهو مجموع !n متجهة حالة بإشارات متناوبة أو ثابتة على الترتيب، يعبر عن حالة موجة لـ n جسمياً متطابقاً مضادة التناظر (فيرميونات) أو متناظرة (بوزونات). لنلاحظ أن المعين يساوي الصفر عند تساوي صفين من صفوفه أي إذا تطابق رقما صفين $(\psi_j(\xi_k) = \psi_i(\xi_k))$ من أجل كل k ونكون بذلك قد عبرنا عن مبدأ الاستبعاد لباولي. هذا في حين لا يؤثر تساوي صفين على قيمة المستديم. لنلاحظ أن كل ما فعلناه هو تعميم لما فعلناه في حالة جسيمين $|\psi_1\rangle$ و $|\psi_2\rangle$.

ومتجهات الحالة المنظمة للواحد على الشكل $(IV.(6.(1.18)_{f,b}$

$$\psi_{\substack{f\\b}} = \psi_{\substack{A\\S}} = \begin{vmatrix} \psi_1(\xi_1) & \psi_1(\xi_2) \\ \psi_2(\xi_1) & \psi_2(\xi_2) \end{vmatrix}_{\mp} \qquad (1.10)$$

2. التوزع القانوني الكبير

1.2– مؤثر الكثافة التابع لعدد الجسيمات

سنبقى في إطار التوزع القانوني لجيبس؛ توجد النظمة الترموديناميكية التي تعنينا A ضمن محم 'A أكبر منها بكثير وتشكلان معاً نظمة *A معزولة ولكننا سنفرض أن النظمة A لا تتبادل الطاقة فقط مع

'A وإنما تتبادل الجسيمات كذلك. ليكن N عدد جسيمات النظمة A المتغير – وهو سبب تسمية التوزع بالقانوني الكبير – ولنرمز بـ n للعدد الكمومي الذي يحدد مستوى الطاقة في التوزع القانوني. لم يعد مستوى الطاقة معيناً بهذا العدد وحده وإنما بعدد جسيمات النظمة المتغير أيضاً إنه E_{nN}. سنكتب إذاً العناصر القطرية لمؤثر الكثافة على الشكل

$$(\rho_{nn})_N \equiv \rho_{nN} \tag{2.1}$$

إن ρ_{nN} هو احتمال وجود النظمة A في الحالة الكمومية n وبعدد جسيمات يساوي N. نرمز بـ N^* لعدد الجسيمات في النظمة الكلية A^* ونستعيد المحاكمة التي اتبعناها في (1.§2.1). لدينا من أجل 'A

$$S'(E') = S'(E^* - E_{nN}; N^* - N) \tag{2.2}$$

إن $N << N^*$ و $E_{nN} << E^*$ ولدينا في ((1.(2.5)

$$\rho_{nN} = \frac{C}{\Delta E'} e^{S'(E^* - E_{nN}; N^* - N)}$$

$$= \frac{C}{\Delta E'} e^{S'(E^*; N^*)} e^{-E_{nN}\frac{\partial S'}{\partial E'}\Big|_{E'=E^*}} \cdot e^{-N\frac{\partial S'}{\partial N'}\Big|_{N'=N^*}}$$

إن $\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E}$ تعريفاً و $\left(\frac{\partial S}{\partial N}\right)_{E,V} = -\frac{\mu}{T}$ التي وجدناها انطلاقاً من $dE = TdS - PdV + \mu dN$

ومنه

$$\rho_{nN} = \alpha e^{-\frac{E_{nN}}{T} + \frac{N\mu}{T}} \tag{2.3}$$

نحسب α بتنظيم ρ للواحد $\sum_{n,N} \rho_{nN} = 1$ ونعين دالة التجزئة في التوزع القانوني الكبير بأن نكتب

$$Z = \frac{1}{\alpha} = \sum_{n,N} e^{\frac{N\mu - E_{nN}}{T}} \tag{2.4}$$

ونكتب (2.3) على الشكل

$$\rho_{nN} = \frac{e^{-\frac{E_{nN}}{T} + \frac{N\mu}{T}}}{Z} \tag{2.3'}$$

لدينا من ((1.(1.22) و '(2.3)

$$S = -\langle Ln\rho \rangle = -Tr\rho Ln\rho = LnZ + \frac{\langle E \rangle}{T} - \frac{\mu \langle N \rangle}{T} \tag{2.5}$$

ومنه

$$-TLnZ = \langle E \rangle - TS - \mu \langle N \rangle = F - \phi = -PV = \Omega$$

لا ننسى تعريف F و ϕ (II.2.§3.1) $F(T, V) = E - TS$ ، $\phi(T, P) = F + PV$ و(II.2.§3.4) وتعريف الكمون الترموديناميكي الكبير Ω عندما يكونان تابعين لعدد الجسيمات حيث يصبح $\phi = \mu N$ (II.2.(3.33)₁). أي أن

$$Z = e^{-\frac{\Omega}{T}} \tag{2.6}$$

A' وإنما تتبادل الجسيمات كذلك. ليكن N عدد جسيمات النظمة A المتغير – وهو سبب تسمية التوزع بالقانوني الكبير – ولنرمز بـ n للعدد الكمومي الذي يحدد مستوى الطاقة في التوزع القانوني. لم يعد مستوى الطاقة معيناً بهذا العدد وحده وإنما بعدد جسيمات النظمة المتغير أيضاً إنه E_{nN}. سنكتب إذاً العناصر القطرية لمؤثر الكثافة على الشكل

$$(\rho_{nn})_N \equiv \rho_{nN} \tag{2.1}$$

إن ρ_{nN} هو احتمال وجود النظمة A في الحالة الكمومية n وبعدد جسيمات يساوي N. نرمز بـ N^* لعدد الجسيمات في النظمة الكلية A^* ونستعيد المحاكمة التي اتبعناها في (1.§2.1). لدينا من أجل A'

$$S'(E') = S'(E^* - E_{nN}; N^* - N) \tag{2.2}$$

إن $N \ll N^*$ و $E_{nN} \ll E^*$ ولدينا في ((1.(2.5)

$$\rho_{nN} = \frac{C}{\Delta E'} e^{S'(E^* - E_{nN};\, N^* - N)}$$

$$= \frac{C}{\Delta E'} e^{S'(E^*;\, N^*)} e^{-E_{nN}\left.\frac{\partial S'}{\partial E'}\right|_{E'=E^*}} \cdot e^{-N\left.\frac{\partial S'}{\partial N'}\right|_{N'=N^*}}$$

إن $\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{T}$ تعريفاً و $\left(\frac{\partial S}{\partial N}\right)_{E,V} = -\frac{\mu}{T}$ التي وجدناها انطلاقاً من $dE = TdS - PdV + \mu dN$

ومنه

$$\rho_{nN} = \alpha e^{-\frac{E_{nN}}{T} + \frac{N\mu}{T}} \tag{2.3}$$

نحسب α بتنظيم ρ للواحد $\sum_{n,N} \rho_{nN} = 1$ ونعين دالة التجزئة في التوزع القانوني الكبير بأن نكتب

$$Z = \frac{1}{\alpha} = \sum_{n,N} e^{\frac{N\mu - E_{nN}}{T}} \tag{2.4}$$

ونكتب (2.3) على الشكل

$$\rho_{nN} = \frac{e^{-\frac{E_{nN}}{T} + \frac{N\mu}{T}}}{Z} \tag{2.3'}$$

لدينا من ((1.(1.22) و '(2.3)

$$S = -\langle Ln\rho \rangle = -TrρLnρ = LnZ + \frac{\langle E \rangle}{T} - \frac{\mu \langle N \rangle}{T} \tag{2.5}$$

ومنه

$$-TLnZ = \langle E \rangle - TS - \mu \langle N \rangle = F - \phi = -PV = \Omega$$

لا ننسى تعريف F و ϕ (II.2.§3.1) $F(T, V) = E - TS$ ، $\phi(T, P) = F + PV$ و(II.2.§3.4) عندما يكونان تابعين لعدد الجسيمات حيث يصبح $\phi = \mu N$ وتعريف الكمون الترموديناميكي الكبير Ω (II.2.(3.33)$_1$). أي أن

$$Z = e^{-\frac{\Omega}{T}} \tag{2.6}$$

قارن مع التوزع القانوني $Z = e^{\frac{F}{T}}$. ولدينا أخيراً بالعودة على '(2.3)

$$\rho_{nN} = e^{\frac{\Omega + \mu N - E_{nN}}{T}} \qquad (2.7)$$

ملاحظات :

1- ننتقل من طاقة هيلمهولتز الحرة $F(T, V, N)$ إلى الكمون الترموديناميكي الكبير $\Omega(T, V, \mu)$ بتحول لوجاندر

$$\Omega(T, V, \mu) = F(T, V, N) - N\frac{\partial F}{\partial N} = F - N\mu = F - \phi = -PV$$

و $d\Omega = -SdT - Nd\mu$ (II.2.(3.30)$_2$).

2- يستبدل التوزع القانوني الكبير الطاقة E بالطاقة $E - \mu N$ وهي طاقة سالبة من أجل $E = 0$. وهكذا يبدو الكمون الكيميائي الموجب μ كطاقة يلزم بذلها لإخراج الجسيم من النظمة A إلى المحم A'. إنه عمل اقتلاع الإلكترون من المعدن على سبيل المثال.

3- عندما نهمل ترجحات عدد الجسيمات N فإن $\Omega + \mu N$ تنطبق على $F(T, V, N)$ (N ثابتة) وننتقل بالتالي من التوزع الكبير إلى التوزع القانوني؛ وهو انتقال مماثل للانتقال من التوزع القانوني إلى التوزع الميكروقانوني عندما نهمل ترجحات الطاقة وننظر إلى النظمة A كنظمة معزولة.

2.2- الصيغة العامة لمؤثر الكثافة

يمكن تعميم التوزعات الثلاثة الميكروقانونية والقانونية والقانونية الكبيرة على النحو التالي :

ليكن للنظمة A عدد ما، n، من المقادير الرصودة (المؤثرات التبادلية مع الهاميلتوني والمنحفظة) نرمز لها بـ A_i، $i = 1, 2, \dots n$؛ يخضع مؤثر الكثافة بالإضافة إلى القيد $Tr\rho = 1$ إلى n قيداً آخر من الشكل

$$\langle A_i \rangle = Tr\rho A_i$$

وعلينا، من جهة أخرى، اختيار قانون احتمال عشوائي قدر الإمكان، إذ لا معنى لفرض إدخال ترتيب ما على حالة النظمة ناتج عن هذه القيود. علينا إذاً أن نعمم مبدأ التحاص بالتساوي وأن نفرض أن لـ $S = Ln\Gamma$ قيمة عظمى في حالة التوازن الترموديناميكي. يجب إذاً أخذ $n+1$ مضروباً للاغرانج وتعيين القيمة العظمى للدالة

$$S - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i Tr\rho A_i - \lambda_0 Tr\rho \qquad (2.8)$$

λ_0 ، λ_i هي مضاريب لاغرانج التي نحسبها بالطريقة المألوفة

$$0 = \delta S - \delta \sum_{i=1}^{n} \lambda_i Tr\rho A_i - \delta\lambda_0 Tr\rho$$

إن $S = -Tr\rho Ln\rho$ وبالتالي $\delta S = -Tr(\delta\rho Ln\rho + \rho\delta Ln\rho) = -Tr\delta\rho(Ln\rho + 1)$

$$0 = -Tr\delta\rho(Ln\rho + 1) - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i Tr\delta\rho A_i - \lambda_0 Tr\delta\rho$$

$$= -Tr\left[\delta\rho\left(Ln\rho + \sum_{i=1}^{n}\lambda_i A_i + \lambda_0 + 1\right)\right]$$

نكتب أثر الجداء على الشكل

$$0 = -\sum_{k,k'} \langle k|\delta\rho|k'\rangle\langle k'|Ln\rho + \sum_{i=1}^{n}\lambda_i A_i + \lambda_0 + 1|k\rangle \quad (2.9)$$

الذي يتضمن انعدام كل عناصر المصفوفة

$$\langle k'|Ln\rho + \sum_{i=1}^{n}\lambda_i A_i + \lambda_0 + 1|k\rangle = 0 \quad (2.10)$$

أياً كان الدليلان k و k'؛ وكالمعتاد قسم منها لأن "التفاضلات" "$\delta\rho_{kk'}$" مستقلة والقسم الآخر، وعدده $n+1$، نعدمه باختيار القيم المناسبة للمضاريب λ_i، λ_0. نحصل من (2.10) على مؤثر الكثافة

$$\rho = \alpha e^{-\sum_{i=1}^{n}\lambda_i A_i - \lambda_0 - 1}$$

و

$$Z = \frac{1}{\alpha} = Tre^{-\sum_{i=1}^{n}\lambda_i A_i} \cdot e^{-\lambda_0 - 1} \quad (2.11)$$

نخرج المقدار الثابت $e^{-\lambda_0 - 1}$ من تحت إشارة Tr ونكتب ρ على الشكل

$$\rho = \frac{e^{-\sum_{i=1}^{n}\lambda_i A_i}}{Tre^{-\Sigma\lambda_i A_i}} \quad (2.12)$$

ونكون بذلك قد تخلصنا من القيد $Tr\rho = 1$ بتنظيمنا المباشر في (2.11)، ومنه

قضية 2 :

إن (2.12) هي الصيغة العامة لمؤثر الكثافة في حالة وجود n مقداراً رصوداً A_i، $i = 1, ..., n$.

يوجد قيد واحد في التوزع القانوني هو القيمة الوسطية للطاقة، مضروب لاغرانج هو $\lambda_1 = \frac{1}{T}$ ويوجد قيدان في التوزع القانوني الكبير، القيمة الوسطية للطاقة والقيمة الوسطية لـ N، ومضروب لاغرانج من أجل N هو $\lambda_2 = -\frac{\mu}{T}$، الخ.

نحسب القيم الوسطية لكل المقادير الرصودة A_i انطلاقاً من دالة التجزئة (2.11). لدينا

$$\langle A_i\rangle = -\frac{\partial}{\partial\lambda_i} LnZ(\lambda_1 ... \lambda_n) \equiv -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\lambda_i} \quad (2.13)$$

من أجل كل i، $i = 1, 2, ... n$.

لدينا كذلك

$$\frac{\partial^2 Z}{\partial\lambda_i \partial\lambda_j} = \mathrm{Tr}\, e^{-\sum_{k=1}^{n}\lambda_k A_k} A_i A_j \qquad (2.14)$$

من أجل كل زوج i, j.

لنلاحظ من (2.13) أن القيمة الوسطية لأي مؤثر رصود هي

$$\langle A_i \rangle = -\frac{1}{Z}\mathrm{Tr}\, e^{-\sum_{k=1}^{n}\lambda_k A_k} A_i \qquad (2.13)'$$

في حين أن القيمة الوسطية لـ $A_i A_j$ هي

$$\langle A_i A_j \rangle = \frac{1}{Z}\mathrm{Tr}\, e^{-\sum_{k=1}^{n}\lambda_k A_k} A_i A_j = \frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial\lambda_i \partial\lambda_j} \qquad (2.14)'$$

نظراً لـ (2.14).

ومنه

$$\frac{\partial^2 \mathrm{Ln}Z}{\partial\lambda_j \partial\lambda_i} = \frac{\partial}{\partial\lambda_j}\left(\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\lambda_i}\right) = -\frac{1}{Z^2}\frac{\partial Z}{\partial\lambda_j}\frac{\partial Z}{\partial\lambda_i} + \frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial\lambda_i \partial\lambda_j} \qquad (2.15)$$

$$= -\langle A_j \rangle \langle A_i \rangle + \langle A_i A_j \rangle$$

تكتسي هذه العلاقة أهمية كبرى لأنها تسمح لنا بالبرهان على :

<u>قضية 3</u> :

إن $\frac{\partial \mathrm{Ln}Z(\lambda_1, ..., \lambda_n)}{\partial\lambda_i}$ دالة متزايدة.

يعتمد البرهان على الخاصة الأساسية للدالات المحدبة Convex وهي أن الشرط اللازم والكافي لكي تكون دالة عددية، f، محدبة هو أن يكون مشتقها الثاني f'' موجباً. ويكافئ ذلك القول أن f' متزايد. ليست Z دالة عددية وإنما بـ n متغيراً فشرط تزايد $\frac{\partial \mathrm{Ln}Z}{\partial\lambda_i}$ هو أن تكون مصفوفة المشتقات الثانية موجبة، أي أن المؤثر موجب. نكتب تعريف المؤثر الموجب $\langle Ax|x \rangle \geq 0$ الصالح من أجل أي متجهة x، ونطبقه على الطرف الثاني من (2.15) واضعين $x = c_1, ... c_n$. يجب إذاً أن يكون مجموع جداءات عناصر المصفوفة، التي نرمز لها α_{ij}، بالمركبات c_j، التي تعين المركبات i لـ Ax، مضروبة بالمركبات i لـ x، أي المقدار التالي موجباً.

$$\sum_{ij} c_i c_j \left[\langle A_i A_j \rangle - \langle A_i \rangle \langle A_j \rangle\right] \geq 0$$

ونتحقق من ذلك بسهولة في كتابته، كما في حال الانحراف التربيعي الوسطي على الشكل

$$0 \leq \left\langle \left| \sum_i c_i A_i - \left\langle \sum_i c_i A_i \right\rangle \right|^2 \right\rangle = \sum_{i,j} c_i c_j \langle A_i A_j \rangle + \left\langle \sum_i c_i A_i \right\rangle^2$$
$$-2\sum_j c_j \langle A_j \rangle \sum_i c_i \langle A_i \rangle$$

وملاحظة أن $\left\langle \sum_i c_i A_i \right\rangle^2 = \sum_i c_i \langle A_i \rangle \sum_j c_j \langle A_j \rangle$.

لازمة :

إن الطاقة دالة متناقصة بـ $\beta = \lambda_1 = \frac{1}{T}$ ومتزايدة بـ T حسب (2.13)؛ وهو ما برهناه في الترموديناميك (القضية 2 في الفصل الثالث).

3.2– حساب عدد الجسيمات. توزع فيرمي–ديراك، وبوز–آنشتاين

لنحدد حالات الطاقة E_{nN} التي تأخذها النظمة A بطاقات مختلف الجسيمات ولتكن ε_k الطاقة التي يأخذها n_k جسيماً في آن واحد. لدينا

$$N = \sum_k n_k \quad \text{و} \quad E_{nN} = \sum_k n_k \varepsilon_k$$

ونكتب Z المعطاة بـ (2.4) على الشكل

$$e^{\frac{\Omega}{T}} = Z = \sum_{n_1, n_2 ..} e^{\frac{1}{T}\sum_k n_k(\mu - \varepsilon_k)} \qquad (2.16)$$

أي أننا نكتب Z على شكل جداء دالات تجزئة Z_k لجسيمات متطابقة تقع في ذات الحالة الكمومية المعبر عنها بـ ε_k، نرمز لـ $\frac{1}{T}$ بـ β ونكتب (2.16) على الشكل

$$Z = \prod_{k=1,2...} Z_k = \prod_{k=1,2...} \sum_{n_k} e^{\beta n_k(\mu - \varepsilon_k)} \qquad (2.17)$$

يمكن لـ n_k أن يأخذ كل القيم الممكنة ... 0, 1, 2 عندما يتعلق الأمر بالبوزونات وبالتالي فإن

$$Z_k = \sum_{n_k} e^{\beta n_k(\mu - \varepsilon_k)} = \frac{1}{1 - e^{\beta(\mu - \varepsilon_k)}} \qquad (2.18)$$

لكن n_k لا يأخذ إلا قيمتين عندما يتعلق الأمر بالفيرميونات (مبدأ الاستبعاد) و

$$Z_k = \sum_{n_k} e^{\beta n_k(\mu - \varepsilon_k)} = 1 + e^{\beta(\mu - \varepsilon_k)} \qquad (2.19)$$

نضع هاتين الصيغتين لتوزع البوزونات والفيرميونات ذات الطاقة ε_k في صيغة واحدة في دالة التجزئة (2.17) على الشكل

$$Z = \prod_k \left(1 - \xi e^{\beta(\mu - \varepsilon_k)}\right)^{-\xi} \quad (2.20)$$

حيث $\xi = +1$ من أجل البوزونات وهذا ما يقابل (2.18) و $\xi = -1$ من أجل الفيرميونات وتقابل الصيغة (2.19). لدينا من هذه العلاقة ومن (2.6) الكمون الترموديناميكي الكبير

$$\Omega = -TLnZ = \xi T \sum_k Ln\left(1 - \xi e^{\beta(\mu - \varepsilon_k)}\right) \quad (2.21)$$

تبين هذه العلاقة أن الكمون Ω جمعي، نكتبه كما يلي

$$\Omega = \sum_k \Omega_k = \sum_k \xi TLn\left(1 - \xi e^{\beta(\mu - \varepsilon_k)}\right) \quad (2.22)$$

والقيمة الوسطية لـ N هي مجموع القيم الوسطية $\langle n_k \rangle$:

$$\langle N \rangle = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = -\sum_k \frac{\partial \Omega_k}{\partial \mu} = \sum_k \langle n_k \rangle \quad (2.23)$$

وهكذا فإن

$$\langle n_k \rangle = -\frac{\partial \Omega_k}{\partial \mu} = -\xi T \frac{-\xi \beta e^{\beta(\mu - \varepsilon_k)}}{1 - \xi e^{\beta(\mu - \varepsilon_k)}}$$

أي

$$\langle n_k \rangle = \frac{e^{\beta(\mu - \varepsilon_k)}}{1 - \xi e^{\beta(\mu - \varepsilon_k)}} \quad (2.23)'$$

وبضرب الصورة والمخرج بـ $e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)}$

$$\langle n_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - \xi} \quad (2.24)$$

وهو توزع منظم بالعلاقة

$$\sum_k n_k = N$$

حيث $\xi = +1$ من أجل البوزونات و $\xi = -1$ من أجل الفيرميونات.

نحصل من التوزع '(2.23) الصالح لنوعي الجسيمات على توزع بولتزمان عندما يكون $e^{\beta(\mu - \varepsilon_k)} << 1$ أي على التوزع

$$\langle n_k \rangle = e^{\beta(\mu - \varepsilon_k)} << 1 \quad (2.25)$$

حيث يختفي المعامل ξ الذي يميز بين متجهات الحالة المتناظرة (البوزونات) والأخرى مضادة التناظر (الفيرميونات). يعني التوزع (2.25) أن الغاز مخلخل، أنه كامل تعريفاً وهو أمر يجب أن يتحقق أياً كانت الطاقة ε_k، يجب إذاً أن يكون $e^{\frac{\mu}{T}} << 1$، وهو شرط محقق عملياً من أجل كل الغازات الذرية أو الجزيئية العادية. يجب أن يكون μ سالباً وكبيراً بالقيمة المطلقة. إن اختفاء المعامل ξ يعني أن متجهات حالة توزع بولتزمان ليست متناظرة أو مضادة التناظر، ولكن التناظر وتضاد التناظر ناتجان عن مبدأ عدم التمييز الذي فرضته تصادمات الجسيمات. وهكذا فإن عدم تمييز الجسيمات المتطابقة لم يعد وارداً

في توزع بولتزمان ولم يعد وارداً معه تصادم الجسيمات. هذا هو حال الجسيمات ذات المواضع المحددة في الجسم الصلب على سبيل المثال وحال الغازات المخلخلة.

ملاحظة هامة :

لننشر Ω_k من أجل البوزونات انطلاقاً من (2.18)، أو (2.22) مع $\xi = 1$

$$\Omega_k = -TLnZ_k = -TLn\sum_{n_k=0}^{\infty} e^{\beta(\mu - \varepsilon_k)n_k}$$

لا يمكن للسلسلة الهندسية أن تكون متقاربة إلا إذا كان $e^{\beta(\mu - \varepsilon_k)} < 1$ وهو شرط يجب أن يتحقق أياً كانت الطاقة ε_k، بما في ذلك طبعاً الطاقة صفر، ويجب بالتالي أن يكون الكمون الكيميائي للبوزونات سالباً، كما في توزع بولتزمان أعلاه.

$$\mu < 0 \tag{2.26}$$

لا يوجد شرط مماثل بالنسبة للفيرميونات، يمكن لكمونها الكيميائي أن يكون موجباً أو سالباً.

4.2– معادلة حالة الغاز الفيرميوني والغاز البوزوني

ننظر للجسيمات كجسيمات أولية تقتصر طاقتها على الطاقة الحركية وحدها. سنرمز بـ dN لعدد الجسيمات الوسطي في عنصر الحجم dV التي تتراوح اندفاعاتها بين $\bar{p}$ و $\bar{p} + d\bar{p}$

$$dN = gdV\frac{d\bar{p}}{(2\pi\hbar)^3}\langle n_p\rangle \tag{2.27}$$

حيث g درجة تدني المستوى $\varepsilon(p)$ و $\langle n_p\rangle$ معطى بـ (2.24). نكامل على كل الحجم ونرمز بـ dN_p لعدد الجسيمات في كل الحجم ونتحول كما فعلنا في دروس الترموديناميك من المتغير p إلى الطاقة $\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$. لدينا

$$dN_\varepsilon = dN_p = gV\frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3}\langle n_p\rangle = gV\frac{4\pi 2^{1/2} m^{3/2}\varepsilon^{1/2}d\varepsilon}{(2\pi\hbar)^3}\langle n_\varepsilon\rangle \tag{2.28}$$

تحل هذه الصيغ محل توزع ماكسويل ((II.(§3.(1.3).

نحصل بالتكامل وبتعويض $\langle n_\varepsilon\rangle$ بعبارتها في (2.24) على العدد الكلي للجسيمات

$$N = \frac{gVm^{3/2}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon}d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - \xi} \tag{2.29}$$

$\xi = \pm 1$ على الترتيب من أجل البوزونات والفيرميونات. نكتب عدد الجسيمات في واحدة الحجوم بالانتقال من المتغير ε إلى $z = \beta\varepsilon$ لنجد

$$n = \frac{N}{V} = \frac{gm^{3/2}T^{3/2}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \frac{\sqrt{z}dz}{e^{z-\beta\mu} - \xi} \quad (2.30)$$

وهي علاقة تعين الكمون الكيميائي للغاز μ، ولو بطريقة غير مباشرة، كتابع لدرجة الحرارة T والكثافة n.

ننتقل من الجمع إلى التكامل في (2.21) ونكتب الكمون الترموديناميكي الكبير Ω على الشكل

$$\Omega = \frac{\xi T g V m^{3/2}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \sqrt{\varepsilon}\,Ln\left(1 - \xi e^{\beta(\mu-\varepsilon)}\right)d\varepsilon \quad (2.31)$$

ونكامل بالتجزئة : $\varepsilon^{1/2}d\varepsilon = \frac{2}{3}d\varepsilon^{3/2}$. ينعدم الجزء المكامل و

$$\frac{dLn\left(1 - \xi e^{\beta(\mu-\varepsilon)}\right)}{d\varepsilon} = \frac{\xi\beta e^{\beta(\mu-\varepsilon)}}{1 - \xi e^{\beta(\mu-\varepsilon)}} \equiv \frac{\xi\beta}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - \xi}$$

وبالتالي $T\beta = 1$ و $\xi^2 = 1$

$$\Omega = -\frac{2}{3}\frac{gVm^{3/2}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - \xi}d\varepsilon \quad (2.31)'$$

نرى من (2.29) حيث $dN_\varepsilon = \frac{gVm^{3/2}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}\frac{\sqrt{\varepsilon}d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - \xi}$ بالمقارنة مع '(2.31) أن الطاقة الكلية

$$E = \int_0^\infty \varepsilon dN_\varepsilon = -\frac{3}{2}\Omega \quad (2.32)$$

وبما أن $\Omega = -PV$ فإن

<u>**قضية 4**</u> :

$$PV = \frac{2}{3}E \quad (2.32)'$$

هذه الصيغة صحيحة من أجل توزع فيرمي–ديراك وتوزع بوز–آنشتاين وهي بالتالي صحيحة في الحالة الحدية لغاز بولتزمان. ولكن E في هذه الحالة تساوي $\frac{3}{2}NT$، حيث يقابل كل درجة حرية $\frac{1}{2}T$ وبالتبديل في '(2.32) نحصل على معادلة حالة الغاز الكامل التقليدية $PV = NT$.

نكتب Ω في '(2.31) كدالة بـ $\beta\mu$ بالانتقال من المتغير ε إلى $z = \beta\varepsilon$ كما في (2.30) :

$$\Omega = -\frac{2}{3}\frac{gVm^{3/2}T^{5/2}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \frac{z^{3/2}dz}{e^{z-\beta\mu} - \xi} \quad (2.31)''$$

نرمز للمقدار المكامل كدالة لا أبعاد لها بالمقدار غير ذي الأبعاد $\frac{\mu}{T}$: $f\left(\frac{\mu}{T}\right)$؛ ويبين حساب الأبعاد في "(2.31) مباشرة أن التكامل f غير ذي أبعاد. هذا يعني أن Ω (والتي أبعادها أبعاد طاقة) متناسبة

مع $T^{5/2}$ فهي إذاً دالة متجانسة بـ T رتبة التجانس فيها $\frac{5}{2}$. وهذا هو حال $f\left(\frac{\mu}{T}\right)$ أيضاً، ذلك أن ضرب وحدة قياس درجة الحرارة بـ λ، مع بقاء وحدات المقادير الأخرى في "(2.31) بدون تغيير، يعطي

$$\lambda^{-5/2}T^{5/2}f\left(\frac{\lambda}{T}\mu\right) = T^{5/2}f\left(\frac{\mu}{T}\right)$$

أي

$$f\left(\frac{\lambda}{T}\mu\right) = \lambda^{5/2}f\left(\frac{\mu}{T}\right)$$

نجري نفس المحاكمة على المتغير μ، أبعاده أبعاد T لنجد

قضية 5 :

إن الكمون الترموديناميكي Ω دالة متجانسة بالمتغيرين μ و T ورتبة التجانس $\frac{5}{2}$.

لازمة :

إن الأنتروبية وعدد الجسيمات دالتان متجانستان بالمتغيرين μ و T ورتبة التجانس $\frac{3}{2}$ لدينا

$$N = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_{V,T} \quad , \quad S = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial T}\right)_{V,\mu}$$

لأن $\Omega = F - \phi = F - \mu N$ و $d\Omega = -SdT - Nd\mu$ كما رأينا، ثم لأن اشتقاق الدالة المتجانسة يخفض رتبة التجانس من n إلى $n - 1$.

وهكذا فإن النسبة $\frac{S}{N}$ دالة متجانسة بالمتغيرين μ و T من الرتبة صفر $\frac{S}{N} = \varphi\left(\frac{\mu}{T}\right)$.

قضية 6 :

تبقى النسبة $\frac{\mu}{T}$ ثابتة في التحولات الكظومة.

ذلك أن S ثابتة في هذه التحولات، كما هو معلوم، و $\varphi\left(\frac{\mu}{T}\right)$ تابعة لـ S وحدها لأن $\frac{S}{N}$ دالة متجانسة من الرتبة الصفر $\varphi\left(\frac{N\mu}{T}\right) = \varphi\left(\frac{\mu}{T}\right)$ ولدينا في هذه الحالة

$$\begin{cases} VT^{3/2} = \text{ثابتــــة} \\ PV^{5/3} = \text{ثابتــــة} \\ T^{5/2}P^{-1} = \text{ثابتــــة} \end{cases} \tag{2.33}$$

إن لـ $f\left(\frac{\mu}{T}\right)$ قيمة ثابتة في التحولات الكظومة وكذلك الأمر لمشتقها f بالنسبة لـ $\frac{\mu}{T}$، نكتب Ω في '(2.31) على الشكل

$$\Omega = cVT^{5/2}f\left(\frac{\mu}{T}\right) \qquad (2.31)'''$$

ومنه

$$N = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_{T,V} = cVT^{3/2}\frac{1}{T}f\left(\frac{\mu}{T}\right)$$

وهو مقدار ثابت ومنه العلاقة الأولى في (2.33). نرمز لهذه الثابتة بـ c' و $f\left(\frac{\mu}{T}\right)$ بـ c''. نضع في الطرف الثاني من "(2.31) $T^{5/2} = \left(\frac{c'}{V}\right)^{5/3}$ والطرف الأول هو $-PV$ لنجد

$$-PV = cV\left(\frac{c'}{V}\right)^{5/3}c''$$

ومنه

$$PV^{5/3} = -cc'^{5/3}c''$$

نكتب "(2.31) بدليل T عوضاً عن V لنحصل على العلاقة الثالثة

$$-P = cT^{5/2}c'$$

لنلاحظ أن هذه العلاقات الثلاث تتطابق مع معادلات التحولات الكظومة لغاز وحيد الذرات (علاقات بواسون في الترموديناميك) ولكن لا علاقة للقوى التي رفعت إليها درجة الحرارة والحجم بالنسبة $\gamma = \frac{c_P}{c_V}$ والمساوية في حالة الغاز وحيد الذرات لـ $5/3$.

لنكتب أخيراً من العلاقة "(2.31) صيغة الضغط التي ستتيح لنا استخلاص معادلة الحالة $f(T, V, P)$. لدينا بضرب الصورة والمخرج للمقدار المكامل بـ $e^{\beta\mu - z}$:

$$P = -\frac{\Omega}{V} = \frac{2}{3}\frac{gm^{3/2}T^{5/2}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \frac{z^{3/2}e^{\beta\mu - z}}{1 - \xi e^{\beta\mu - z}}dz$$

نفترض $e^{\beta\mu} << 1$ وننشر المخرج $\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 \ldots$. لدينا، عندما نتوقف عند الحد الخطي، التكامل

$$\int_0^\infty z^{3/2}e^{\beta\mu - z}\left(1 + \xi e^{\beta\mu - z}\right)dz$$

نضع $z^{1/2} = x$، $dz = 2xdx$ وملاحظة أن[2]

$$\int_0^\infty x^4 e^{-\alpha x^2}dx = \frac{3}{8}\sqrt{\pi}\alpha^{-5/2}$$

---

[2] انظر العلاقة (9) في ملحق الفصل الأول.

نجد

$$\Omega = -PV = \frac{-gVm^{3/2}T^{5/2}e^{\beta\mu}}{(2\pi)^{3/2}\hbar^3}\left(1 + \xi\frac{1}{2^{5/2}}e^{\beta T}\right) \qquad (2.34)$$

نحصل عند التوقف عند الحد الأول من هذه العلاقة الذي يهمل ξ، الذي لا يفرق بين متجهات الحالة المتناظرة ومضادة التناظر على توزع بولتزمان شبه التقليدي والذي يعطي قيمة الكمون الكيميائي التي توصلنا إليها في هذا التقريب ((3.29).1) (مع $g = 1$ من أجل الغاز وحيد الذرات). نكتب إذاً Ω عندما نتابع النشر إلى الحد الثاني على الشكل

$$\Omega = \Omega_{Boltz} - \xi\frac{gVm^{3/2}T^{5/2}}{16\pi^{3/2}\hbar^3}e^{2\beta\mu} \qquad (2.35)$$

نطبق الملاحظة (((3.9).3).II) التي تبين لنا أن تغيرات الكمونات الترموديناميكية الصغيرة هي نفسها، عندما تطبق بالمتغيرات المقابلة S, V, N ؛ T, V, N ؛ S, P, N ؛ T, V, μ على E ، F ، ϕ ، H ، Ω على الترتيب ونكتب إذاً

$$F = F_{Boltz} - \xi\frac{gVm^{3/2}T^{5/2}}{16\pi^{3/2}\hbar^3}e^{2\beta\mu} \qquad (2.36)$$

نضع في هذه العلاقة قيمة μ المحسوبة في ((3.29).1) مع الإشارة على وجود g مضروبة بالحجم عندما لا يكون الغاز وحيد الذرات

$$e^{2\beta\mu} = \left[\frac{N}{gV}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mT}\right)^{3/2}\right]^2$$

لنجد

$$F = F_{Boltz} - \frac{\xi\pi^{3/2}N^2\hbar^3}{2gVT^{1/2}m^{3/2}} \qquad (2.36)'$$

ومنه

$$PV = -\frac{\partial F}{\partial V}V = (PV)_{Boltz} - \frac{\xi\pi^{3/2}N^2\hbar^3}{2gVT^{1/2}m^{3/2}}$$

وهكذا فإن معادلة الغاز الكامل الكمومية هي

$$PV = NT\left(1 - \frac{\xi\pi^{3/2}N\hbar^3}{2gVT^{3/2}m^{3/2}}\right) \qquad (2.37)$$

تنطبق هذه المعادلة على معادلة بولتزمان من أجل درجات الحرارة المرتفعة، على عكس حالة درجات الحرارة المنخفضة حيث ترتفع الفروق بين خواص الغاز التقليدي والغاز الكمومي ويظهر مفعول التدني أكثر فأكثر. ترينا هذه العلاقة أن الضغط يرتفع بالنسبة للضغط التقليدي في حالة الفيرميونات ($\xi = -1$) وينخفض في حالة البوزونات أو بعبارة أخرى تظهر قوى فعالة نابذة إضافية بين الجسيمات الفيرميونية وقوى جاذبة فعالة إضافية بين الجسيمات البوزونية.

5.2- الغاز الكامل خارج حالة التوازن

نريد حساب الأنتروبية انطلاقاً من عدد الحالات المتاحة في حالات توزع بولتزمان، فيرمي-ديراك وبوز-آنشتاين. لنقسم الحالات الكمومية في الغاز إلى مجموعات من الحالات المتقاربة، متقاربة الطاقة على وجه الخصوص، نرقم هذه المجموعات بـ j، ...$j = 1, 2$ وليكن G_j عدد الحالات الكمومية المتقاربة في المجموعة j – عدد مستويات الطاقة في هذه المجموعة على سبيل المثال. ليكن N_j عدد الجسيمات الموجودة في المجموعة j. إن هذه المجموعات مستقلة عن بعضها وعدد الحالات المتاحة للنظمة الكمومية هي

$$\Gamma = \prod_j \Gamma_j \qquad (2.38)$$

ولنحسب Γ_j في مختلف التوزعات.

a- إن عدد الجسيمات N_j في توزع بولتزمان للغاز الكامل (المخلخل) الكبير في حد ذاته، صغير جداً أمام عدد الحالات المتقاربة للنوع j : $N_j << G_j$، مما يسمح لنا بالقول إن الجسيمات تتوزع بشكل مستقل بين مختلف الحالات الكمومية – بين مختلف مستويات الطاقة المتقاربة –، أي أن عدد الحالات المتاحة هي

$$\Gamma_j = \frac{G_j^{N_j}}{N_j!} \qquad (2.38)_a$$

قسمنا على $N_j!$ كالمعتاد لأن الجسيمات متطابقة وتبديلاتها لا تعين حالات متاحة جديدة وبالتبديل في (2.38) نحصل على الأنتروبية

$$S = Ln\Gamma = \sum_j N_j LnG_j - LnN_j!$$

وباستعمال صيغة ستراينغ

$$S = \sum_j N_j Lne\frac{G_j}{N_j} \qquad (2.39)_a$$

b- أما في توزع بوز-أنشتاين فمن الممكن على عكس الحالة السابقة أن نجد في كل مجموعة G_j ما نشاء من الجسيمات $N_j >> G_j$. حسبنا توزع N_j كرة متطابقة في G_j صندوقاً ووجدنا (1.§3.3) أن

$$\Gamma_j = \frac{(G_j + N_j - 1)!}{(G_j - 1)!N_j!} \qquad (2.38)_b$$

نهمل في نشر الصورة 1، 2... $(G - 1)$ أمام N_j ليصبح $N_j^{G_j - 1}N_j!$ ومنه

$$\Gamma_j = \frac{N_j^{G_j - 1}}{(G_j - 1)!} \qquad (2.38)'_b$$

ومنه بإهمال الواحد أمام G_j

$$S = \sum G_j Ln \frac{eN_j}{G_j} \qquad (2.39)_b$$

c– لدينا أخيراً في توزع فيرمي ديراك توزع N_j جسيماً متطابقاً على G_j حالة لا تستوعب كل منها إلا جسيماً واحداً. إنه التوزع النظامي ولدينا

$$\Gamma_j = \frac{G_j!}{N_j!(G_j - N_j)!} \qquad (2.38)_c$$

ومنه

$$S = \sum_j G_j LnG_j - N_j LnN_j - (G_j - N_j) Ln(G_j - N_j) \qquad (2.39)_c$$

لنلاحظ أنه يمكن كتابة هذه الأنتروبيات الثلاث بدليل عدد الجسيمات الوسطي في النوع j $\langle n_j \rangle = \frac{N_j}{G_j}$

وإيجاد هذا العدد في حال التوازن بحساب القيمة الأعظمية للأنتروبية المقيدة بالعلاقتين

$$\sum_j N_j = \sum G_j \langle n_j \rangle = N$$

$$\sum_j \varepsilon_j N_j = \sum_j \varepsilon_j G \langle n_j \rangle = E$$

إنها طريقة أخرى للحصول على التوزعات المذكورة نتركها للقارئ كتمرين.

3. خواص الغاز في جوار الصفر المطلق

1.3– الغاز الإلكتروني المتدني

أ– لنبدأ بدراسة الغاز الإلكتروني المتدني كلياً، أي في درجة حرارة الصفر المطلق. ستتوزع الإلكترونات على مختلف الحالات الكمومية المتاحة؛ $g = 2$ من أجل كل حالة إلكترونية ولكننا لن ندخل هذه العدد 2، لكي تكون الصيغ التي سنكتبها صالحة للتطبيق على قيم أخرى لـ g. وبما أنه لا يمكن وجود سوى إلكترون واحد في كل حالة كمومية فستحتل الإلكترونات مستويات طاقة انطلاقاً من الطاقة الصغرى (الطاقة 0) إلى طاقة عظمى يحددها عدد الإلكترونات في الغاز. نكتب عدد هذه المستويات بدليل الاندفاع $\bar{p}$، إنها

$$\frac{gVd\bar{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{gV4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3}$$

إن تكامل هذه الكثافة الطاقية إلى قيمتها العظمى المعينة بـ p_0 يعطينا العدد الكلي للإلكترونات الموجودة

$$N = \frac{gV}{2\pi^2\hbar^3}\int_0^{p_0} p^2 dp = \frac{gVp_0^3}{6\pi^2\hbar^3} \qquad (3.1)$$

ومنه القيمة الحدية للاندفاع بدليل عدد الإلكترونات في واحدة الحجوم

$$p_0 = \left(\frac{6\pi^2}{g}\right)^{1/3}\left(\frac{N}{V}\right)^{1/3}\hbar \qquad (3.1)'$$

نكتب p_0 غالباً على الشكل p_F وهي نصف قطر كرة في فضاء الاندفاع تعرف باسم كرة فيرمي: تقع كل الإلكترونات في هذه الكرة.

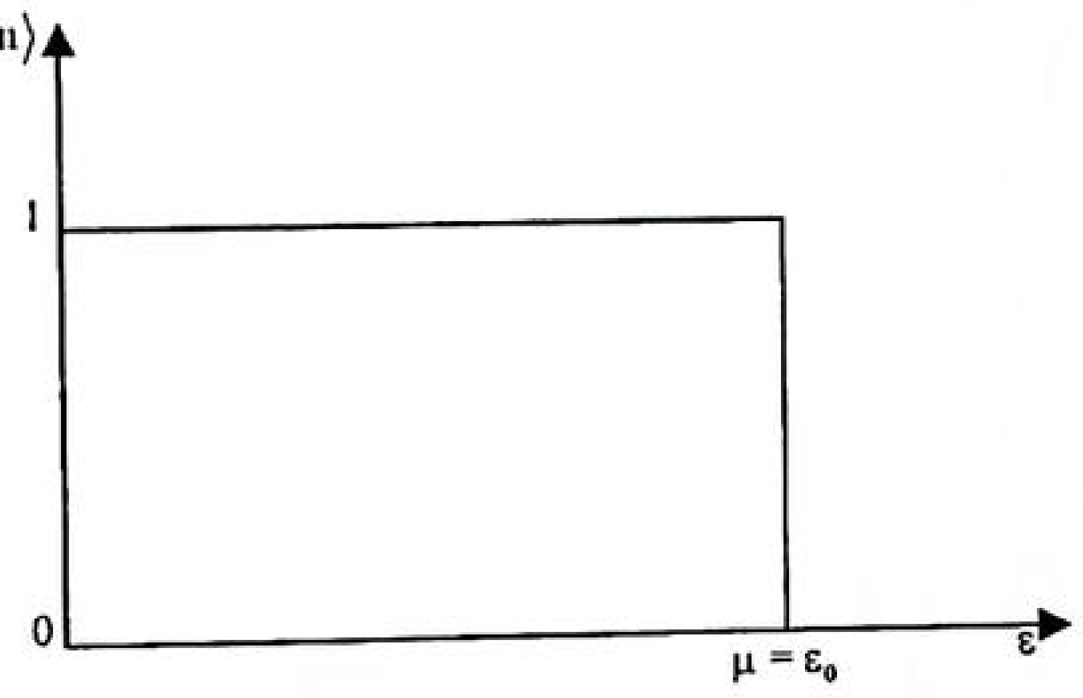
لدينا بالتالي الطاقة الحدية التي تصل الإلكترونات إليها في درجة الصفر المطلق

$$\varepsilon_0 = \frac{p_0^2}{2m} = \left(\frac{6\pi^2}{g}\right)^{2/3}\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}\frac{\hbar^2}{2m} \qquad (3.2)$$

لننظر إلى توزع فيرمي في درجة الصفر المطلق. لدينا من (2.24) ($\xi = -1$)

$$n(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{(\varepsilon-\mu)}{T}}+1} \underset{T\to 0}{\rightarrow} \begin{cases} 1\ , & \varepsilon < \mu \\ 0\ , & \varepsilon > \mu \end{cases} \qquad (3.3)$$

(لا تأخذ هذه العلاقة بعين الاعتبار التدني $g = 2$) حالة كمومية واحدة للإلكترون ولكن إلكترونين في مستوى الطاقة. يتناهى هذا التوزع عندما تتناهى $T \to 0$ إلى 1 إذا كانت $\varepsilon < \mu$ وإلى الصفر إذا كانت $\varepsilon > \mu$ فهو إذاً دالة (توزيعة) هيفيسايد $\theta(\mu - \varepsilon)$، ونقطة القفز $\mu = \varepsilon_0$ هي الطاقة الحدية التي حسبناها أعلاه. تعرف هذه الطاقة باسم طاقة فيرمي[3]، الشكل.3.

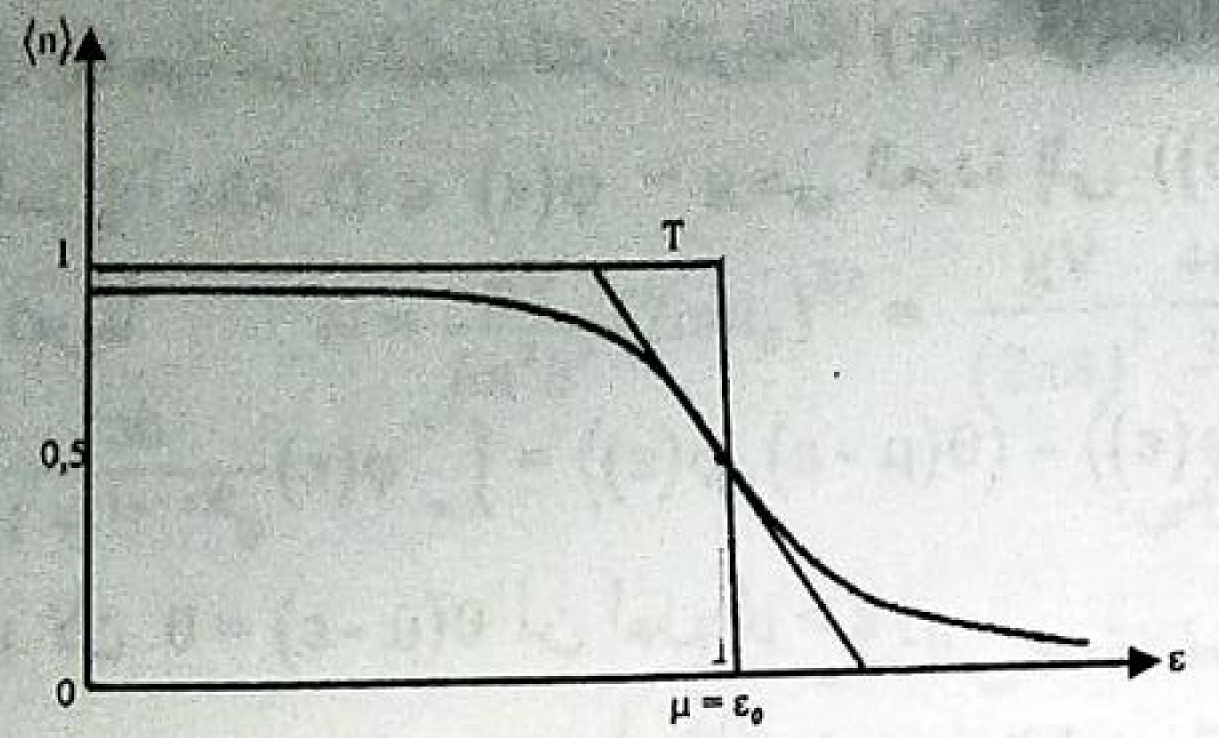


الشكل.3

عندما ترتفع T عن الصفر، تأخذ الإلكترونات في احتلال مستويات طاقة أعلى من مستوى الطاقة $\mu = \varepsilon_0$، ينخفض العدد الوسطي $\langle n \rangle$ عن الواحد حسب المنحني، الشكل.4.

---

[3] إنها تساوي بدرجات الحرارة $\frac{\varepsilon_0}{k}$ لـ $82000°K$ من أجل النحاس وتبلغ قيماً أعلى بكثير كما تبين العلاقة (3.2) من أجل الفيرميونات عالية الكثافة، كما في النجوم النوترونية حيث تساوي $10^{11}°K$ - 10^{10} بينما رتبة درجة حرارة هذه النجوم هي $10^{8}°K$.



الشكل.4

يساوي مشتق الدالة (3.3) بالنسبة لـ ε في النقطة $\varepsilon = \mu$ ، $-\frac{1}{4T}$، حيث $n(\mu) = \frac{1}{2}$ والمشتق الثاني معدوم. فالنقطة $\left(\mu, \frac{1}{2}\right)$ هي نقطة انعطاف المنحني وانتقال حاد من القيمة $n \simeq 1$ المقاربة للمستقيم $\langle n\rangle = 1$ إلى القيمة $\langle n\rangle \simeq 0$ المقاربة للمستقيم $\langle n\rangle = 0$؛ إنها نقطة تناظر المنحني.

يفضل لدراسة الدالة (التوزيعة) $n(\varepsilon)$ كتابتها بدليل المماس الزائدي

$$n(\varepsilon) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\,\mathrm{th}\frac{(\varepsilon - \mu)}{2T} \tag{3.4}$$

ذلك أن

$$\frac{1}{e^x + 1} = \frac{e^{-x/2} + e^{x/2} - e^{x/2}}{e^{x/2} + e^{-x/2}} = -\mathrm{th}\frac{x}{2} + \frac{e^{x/2}}{e^{x/2} + e^{-x/2}}$$

نكتب الحد الأخير على الشكل $\frac{1}{1+e^{-x}} \equiv 1 - \frac{1}{1+e^{x}}$ ومنه (3.4).

إن الطاقة الكلية للغاز الإلكتروني المتدني تماماً هي

$$E = \frac{gV}{(2\pi\hbar)^3}\int_0^{p_0}\frac{p^2}{2m}4\pi p^2 dp = \frac{gV}{4\pi^2 m\hbar^3}\frac{p_0^5}{5} \tag{3.5}$$

ومن '(3.1)

$$E = \frac{3}{10}\left(\frac{6\pi^2}{g}\right)^{2/3}\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} N \tag{3.5'}$$

نحصل من العلاقة العامة الصالحة في كل التوزعات $PV = \frac{2}{3}E$ على ضغط الغاز وبالتالي على معادلة الحالة للغاز الإلكتروني المتدني تماماً

$$P = \frac{1}{5}\left(\frac{6\pi^2}{g}\right)^{2/3}\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{N}{V}\right)^{5/3} \tag{3.6}$$

يتناسب ضغط الغاز مع القوة $\frac{5}{3}$ لكثافة الغاز.

ب- هذا في الصفر المطلق، أما في جواره فيجب نشر التوزيعة $n(\varepsilon)$ في جوار قيمتها في النقطة صفر أي في جوار $\theta(\mu-\varepsilon)$. نأخذ إذاً دالة $\varphi(\varepsilon) \in D$ – يرجى العودة إلى (IV.(5.§5)) لتذكر مبادئ نظرية التوزيعات –، ونكتب تعريفاً

$$\langle n(\varepsilon), \varphi(\varepsilon)\rangle - \langle \theta(\mu-\varepsilon), \varphi(\varepsilon)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} - \int_{-\infty}^{\mu}\varphi(\varepsilon)d\varepsilon \qquad (3.7)$$

يتوقف التكامل الثاني عند μ لأن $\theta(\mu-\varepsilon) = 0$ من أجل $\varepsilon > \mu$.

ننتقل من المتغير ε إلى المتغير $x = \beta(\varepsilon-\mu)$، $d\varepsilon = \frac{1}{\beta}dx$ ليصبح الطرف الثاني

$$= \frac{1}{\beta}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\varphi\left(\mu+\frac{x}{\beta}\right)dx}{e^x+1} - \frac{1}{\beta}\int_{-\infty}^{0}\varphi\left(\mu+\frac{x}{\beta}\right)dx$$

$$= \frac{1}{\beta}\int_{0}^{\infty}\frac{\varphi\left(\mu+\frac{x}{\beta}\right)dx}{e^x+1} - \frac{1}{\beta}\int_{-\infty}^{0}\varphi\left(\mu+\frac{x}{\beta}\right)\left(1-\frac{1}{e^x+1}\right)dx$$

إن $1 - \frac{1}{e^x+1}$ في التكامل الثاني هو $\frac{1}{e^{-x}+1}$، نقوم بالتحول من x إلى $-x$ في هذا التكامل لتأخذ (3.7) الشكل

$$= \frac{1}{\beta}\int_{0}^{\infty}\frac{1}{e^x+1}\left[\varphi\left(\mu+\frac{x}{\beta}\right) - \varphi\left(\mu-\frac{x}{\beta}\right)\right]dx$$

ننشر الدالة بين المعقوفتين في جوار μ، $\frac{x}{\beta}$ متناهية في الصغر من أجل $\beta \to \infty$ في جوار الصفر المطلق؛ تختفي المشتقات الزوجية ويبقى

$$= \frac{2}{\beta}\int_{0}^{\infty}\frac{1}{e^x+1}\left[\varphi'(\mu)\frac{x}{\beta} + \frac{\varphi'''(\mu)}{3!}\frac{x^3}{\beta^3} + \ldots\right]dx$$

نكتفي بالحد الخطي بـ x :

$$\cong \frac{2}{\beta^2}\varphi'(\mu)\int_{0}^{\infty}\frac{xdx}{e^x+1} = \frac{2}{\beta^2}\varphi'(\mu)\cdot\frac{\pi^2}{6}$$

حيث التكامل هو $\zeta(2)$ حسب "(19) في ملحق الفصل الأول.

نكتب $\varphi'(\mu)$ بدليل $\varphi(\varepsilon)$ حسب تعريف مشتق التوزيعة $\varphi(\mu) = \langle\delta(\varepsilon-\mu), \varphi(\varepsilon)\rangle$ (IV.(5.(5.10)))

$$\varphi'(\mu) \equiv -\langle\delta'(\varepsilon-\mu), \varphi(\varepsilon)\rangle$$

ومنه أخيراً

$$n(\varepsilon) = \theta(\mu-\varepsilon) - \frac{2\pi^2}{6\beta^2}\delta'(\varepsilon-\mu) \qquad (3.8)$$

نستخلص من هذه العلاقة صيغة عدد الإلكترونات بدليل الكمون الكيميائي المقابل لـ ε_0 والذي سنكتبه هنا μ_0؛ لدينا من (3.1)

$$N = \frac{gV}{6\pi^2\hbar^3}(2m\mu_0)^{3/2} \equiv \frac{gV}{(2\pi\hbar)^3}\frac{4\pi}{3}(2m\mu_0)^{3/2} \qquad (3.1)''$$

المتناسب مع حجم كرة فيرمي.

ومن (3.8) حيث نكتب الطاقة على الشكل $\frac{p^2}{2m}$

$$N = \frac{gV}{(2\pi\hbar)^3}\int_0^\infty 4\pi p^2 dp\left[\theta\left(\mu - \frac{p^2}{2m}\right) - \frac{2\pi^2}{6\beta^2}\delta'\left(\frac{p^2}{2m} - \mu\right)\right]$$

إن حد التكامل الأول هو $\sqrt{2m\mu}$ ويساوي بالتالي $\frac{4\pi}{3}(2m\mu)^{3/2}$. ننتقل في التكامل الثاني من المتغير p إلى المتغير $x = \frac{p^2}{2m}$ ولدينا، كما فعلنا للوصول إلى (3.8)

$$\langle x^{1/2}, \delta'(x-\mu)\rangle = -\frac{1}{2}\langle x^{-1/2}, \delta(x-\mu)\rangle = -\frac{1}{2}\mu^{-1/2}$$

والتكامل $\int_0^\infty$ هو نصف المقدار. وأخيراً

$$N = \frac{gV}{(2\pi\hbar)^3}\left[\frac{4\pi}{3}(2m\mu)^{3/2} + \frac{\pi^3(2m)^{3/2}\mu^{-1/2}}{6\beta^2}\right] \qquad (3.9)$$

أي أن، بالمقارنة مع "(3.1)

$$\mu_0^{3/2} = \mu^{3/2} + \frac{3\pi^2}{4\cdot 6\beta^2}\mu^{-1/2}$$

أو

$$\mu_0^{3/2} = \mu^{3/2}\left(1 + \frac{3\pi^2}{4\cdot 6\beta^2}\mu^{-2}\right)$$

$$\mu = \mu_0\left(1 + \frac{3\pi^2}{4\cdot 6\beta^2}\mu^{-2}\right)^{-2/3}$$

$$\mu = \mu_0\left(1 - \frac{\pi^2}{12}\frac{T^2}{\mu_0^2} + \dots\right) \qquad (3.10)$$

حيث استبدلنا في النشر μ^{-2} بـ μ_0^{-2}.

نحصل من (3.9) على مختلف المقادير الترموديناميكية؛ ولدينا بشكل خاص، نظراً لأن $N = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_{TV}$،

$$\Omega = -\frac{gV}{(2\pi\hbar)^3}\left[\frac{2}{5}\frac{4\pi}{3}(2m)^{3/2}\mu^{5/2} + \frac{2\pi^3(2m)^{3/2}\mu^{1/2}}{6\beta^2}\right]$$

نستخلص من هذه العلاقة صيغة عدد الإلكترونات بدليل الكمون الكيميائي المقابل لـ ε_0 والذي سنكتبه هنا μ_0؛ لدينا من (3.1)

$$N = \frac{gV}{6\pi^2\hbar^3}(2m\mu_0)^{3/2} \equiv \frac{gV}{(2\pi\hbar)^3}\frac{4\pi}{3}(2m\mu_0)^{3/2} \qquad (3.1)''$$

المتناسب مع حجم كرة فيرمي.

ومن (3.8) حيث نكتب الطاقة على الشكل $\frac{p^2}{2m}$

$$N = \frac{gV}{(2\pi\hbar)^3}\int_0^\infty 4\pi p^2 dp\left[\theta\left(\mu - \frac{p^2}{2m}\right) - \frac{2\pi^2}{6\beta^2}\delta'\left(\frac{p^2}{2m} - \mu\right)\right]$$

إن حد التكامل الأول هو $\sqrt{2m\mu}$ ويساوي بالتالي $\frac{4\pi}{3}(2m\mu)^{3/2}$. ننتقل في التكامل الثاني من المتغير p إلى المتغير $x = \frac{p^2}{2m}$ ولدينا، كما فعلنا للوصول إلى (3.8)

$$\left\langle x^{1/2}, \delta'(x-\mu)\right\rangle = -\frac{1}{2}\left\langle x^{-1/2}, \delta(x-\mu)\right\rangle = -\frac{1}{2}\mu^{-1/2}$$

والتكامل $\int_0^\infty$ هو نصف المقدار. وأخيراً

$$N = \frac{gV}{(2\pi\hbar)^3}\left[\frac{4\pi}{3}(2m\mu)^{3/2} + \frac{\pi^3(2m)^{3/2}\mu^{-1/2}}{6\beta^2}\right] \qquad (3.9)$$

أي أن، بالمقارنة مع "(3.1)

$$\mu_0^{3/2} = \mu^{3/2} + \frac{3\pi^2}{4\cdot 6\beta^2}\mu^{-1/2}$$

أو

$$\mu_0^{3/2} = \mu^{3/2}\left(1 + \frac{3\pi^2}{4\cdot 6\beta^2}\mu^{-2}\right)$$

$$\mu = \mu_0\left(1 + \frac{3\pi^2}{4\cdot 6\beta^2}\mu^{-2}\right)^{-2/3}$$

$$\mu = \mu_0\left(1 - \frac{\pi^2}{12}\frac{T^2}{\mu_0^2} + \dots\right) \qquad (3.10)$$

حيث استبدلنا في النشر μ^{-2} بـ μ_0^{-2}.

نحصل من (3.9) على مختلف المقادير الترموديناميكية؛ ولدينا بشكل خاص، نظراً لأن $N = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_{TV}$،

$$\Omega = -\frac{gV}{(2\pi\hbar)^3}\left[\frac{2}{5}\frac{4\pi}{3}(2m)^{3/2}\mu^{5/2} + \frac{2\pi^3(2m)^{3/2}\mu^{1/2}}{6\beta^2}\right]$$

$$\Omega = \frac{-gV(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}\left(\frac{8}{15}\mu^{5/2} + \frac{1}{3}\pi^3 T^2 \mu^{1/2}\right) \tag{3.11}$$

ومنه الأنتروبية المتناسبة مع درجة الحرارة

$$S = -\frac{\partial\Omega}{\partial T} = \frac{gV(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}\frac{2\pi^3\mu^{1/2}}{3}T \tag{3.12}$$

ومن (2.32)

$$E = -\frac{3}{2}\Omega = \frac{3gV}{2(2\pi\hbar)^3}\left[\frac{2}{5}\frac{4\pi}{3}(2m)^{3/2}\mu^{5/2} + \frac{2\pi^3(2m)^{3/2}\mu^{1/2}}{6\beta^2}\right] \tag{3.13}$$

ونحصل على الحرارة النوعية للغاز الإلكتروني المتدني، المتناسبة هي أيضاً مع درجة الحرارة

$$C = T\frac{\partial S}{\partial T} = S \tag{3.14}$$

لنلاحظ أننا لم نفرق بين الحرارة النوعية بضغط ثابت أو حجم ثابت لأننا رأينا (في نهاية 1.§4.3) أنه في حالة تناهي S نحو الصفر كقوة T^n عندما تتناهى T نحو الصفر فإن $c_P - c_V$ يتناهى كقوة T^{2n+1}، وهو هنا $C_P - C_V \underset{T\to 0}{\sim} T^3$.

لنلاحظ أنه يمكننا كتابة الكمون الترموديناميكي Ω ومعه كل الكمونات (الطاقات الأخرى) على صورة مقدارين، كما فعلنا في (2.35) أولهما يقابل درجة الحرارة صفر والآخر التقريب الأول لها :

نحصل بكتابة N في (3.1) بدليل μ_0 على Ω_0 : $N = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_0$ التي تنطبق على الحد الأول في الطرف الثاني من (3.11) من أجل $\mu = \mu_0$، ومنه

$$\Omega = \Omega_0 - \frac{gVT^2}{12\hbar^3}m^{3/2}\sqrt{2\mu} \tag{3.11'}$$

نكتب هذا التقريب الأول بإهمال الحدود من الدرجة الرابعة بـ T عند نشر μ المعطى في (3.10)، أي باستبدال μ بـ $\varepsilon_0 = \mu_0$ المحسوبة في (3.2) لنجد بحساب بسيط

$$\Omega = \Omega_0 - \frac{1}{2}\left(\frac{g\pi}{6}\right)^{2/3}\frac{m}{\hbar^2}NT^2\left(\frac{V}{N}\right)^{2/3} \tag{3.11''}$$

تتيح لنا هذه الكتابة التعبير عن المقادير الترموديناميكية الأخرى، S ، E ، C بدليل المقدار $\left(\frac{V}{N}\right)^{2/3}$؛ نرمز بـ γ للمقدار

$$\gamma = \left(\frac{g\pi}{6}\right)^{2/3}\frac{m}{\hbar^2}$$

ونكتب

$$S = \gamma NT\left(\frac{V}{N}\right)^{2/3} \tag{3.12'}$$

$$C = \gamma NT\left(\frac{V}{N}\right)^{2/3} \qquad (3.14)'$$

و

$$E = E_0 + \frac{\gamma}{2} NT^2\left(\frac{V}{N}\right)^{2/3}$$

E_0 هنا هي طاقة الغاز المتدني كلياً المعطاة في (3.5) ومنه

$$E = E_0\left(1 + 0{,}0713\ g^{4/3}\left(\frac{mT}{\hbar^2}\right)^2\left(\frac{V}{N}\right)^{4/3}\right) \qquad (3.15)$$

لنبد الآن ملاحظة أخيرة قائلين إن غاز فيرمي، الغاز الإلكتروني، ليس ذا شحنة كهربائية لأن الغاز المكون من إلكترونات منفردة غير مستقر. يأخذ غاز فيرمي بعين الاعتبار التفاعل الكولومبي بين الإلكترونات المتحركة والنويات، $\frac{Ze^2}{a}$، حيث Z العدد الذري و a المسافة الوسطية بين إلكترون والنواة؛ رتبة هذه المسافة هي رتبة المسافة بين النويات $\left(\frac{V}{N/Z}\right)^{1/3}$. يكون الغاز كاملاً عندما تصبح طاقة التفاعل مهملة أمام الطاقة الحركية :

$$\frac{Ze^2}{a} = \frac{Z^{2/3}e^2}{\left(\frac{V}{N}\right)^{1/3}} << \varepsilon_0$$

ونظراً لـ (3.2) فإن هذه العلاقة تكافئ بإهمال الحد $\frac{1}{2}\left(\frac{6\pi^2}{g}\right)^{2/3}$

$$\frac{N}{V} >> \left(\frac{e^2 m}{\hbar^2}\right)^3 Z^2$$

وهكذا فالغاز الإلكتروني أكثر كمالاً عندما تكون كثافته أكبر ما يمكن.

2.3– الغاز البوزوني المتدني

يختلف الغاز البوزوني المتدني اختلافاً كلياً عن الغاز الفيرميوني المتدني، إذ يستحيل على طاقته في درجة الحرارة صفر أن تأخذ أي قيمة عدا القيمة صفر؛ ذلك أننا رأينا أن كمونه الكيميائي سالب وهكذا فإن أي قيمة للطاقة (الموجبة طبعاً) تختلف عن الصفر $\varepsilon \neq 0$ تعطي عدداً وسطياً حسب (2.24)

$$\langle n_k \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_k - \mu}{T}} - 1} \underset{T \to 0}{\to} 0 \qquad (3.16)$$

تحتل كل البوزونات في درجة الحرارة صفر طاقة القاع $\varepsilon = 0$. تعرف هذه الظاهرة باسم تكثف بوز-آنشتاين؛ إلا أنه لابد من الإشارة إلى أن هذا التكثف لا يعني تكثفاً حقيقياً في حجم ما وإنما تكثفاً في فضاء الاندفاعات.

لنكتب العلاقة (2.29) التي تعطينا كثافة الغاز (الحقيقية هنا) على الشكل

$$d = \frac{N}{V} = \frac{gm^{3/2}T^{3/2}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \frac{\sqrt{z}}{e^{z-\frac{\mu}{T}}-1}dz \qquad (3.17)$$

مذكرين أننا وضعنا المتغير $z = \frac{\varepsilon}{T}$.

إن $\frac{\partial \mu}{\partial T} = -s$: ترتفع قيمة الكمون الكيميائي عندما تنخفض درجة الحرارة وبما أنها سالبة فمعنى ذلك أن قيمتها المطلقة تنخفض إلى أن تصل إلى الصفر. تعين العلاقة درجة الحرارة هذه، T_0، بدليل d الثابتة

$$d = \frac{gm^{3/2}T_0^{3/2}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \frac{\sqrt{z}}{e^{z}-1}dz \qquad (3.18)$$

إن التكامل هو $\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)$ المساوي لـ $2{,}612 \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ (انظر العلاقات (17)، (5)، (21) في ملحق الفصل الأول) ومنه

$$T_0 = \left(\frac{d2^{1/2}\pi^2\hbar^3}{gm^{3/2}}\right)^{2/3}\left(\frac{1}{\zeta(3/2)\Gamma(3/2)}\right)^{2/3} = \left(\frac{d}{g}\right)^{2/3}\frac{\hbar^2}{m}3{,}31 \qquad (3.19)$$

ولكن ما هي قيمة μ عندما تنخفض درجة الحرارة إلى $T < T_0$ التي تعني أن $\int_0^\infty \frac{\sqrt{z}}{e^{z}-1}dz < \int_0^\infty \frac{\sqrt{z}}{e^{z-\frac{\mu}{T}}-1}$؟ الأمر مستحيل نظراً لأن المقدارين تحت إشارة التكامل موجبان ويستحيل أن يكون $e^{z-\frac{\mu}{T}} < e^{z}$ من أجل أي قيمة سالبة لـ μ. وهو ما يناقض ضرورة كون الكمون الكيميائي سالباً من أجل كل درجات الحرارة.

سنقبل لرفع هذا التناقض أن $\mu = 0$ من أجل $T < T_0$. والتناقض تناقض ظاهري في واقع الأمر منشؤه الانتقال من الجمع $\sum_k \langle n_k \rangle = N$ في (2.24) إلى التكامل في (2.29) : إن الحد الأول في الجمع $\langle n_0 \rangle$ المقابل للطاقة $\varepsilon = 0$ هو $\frac{1}{e^{-\frac{\mu}{T}}-1}$؛ يجب أن يتناهى هذا المقدار إلى اللانهاية عندما تسعى T نحو الصفر لأن كل البوزونات هي في طاقة القاع. ويقابل هذا الحد في التكامل القيمة صفر نظراً لوجود $\sqrt{\varepsilon}$ في الصورة. نتخلص من هذا الاختلاف بإعطاء قيمة منتهية غير محددة من أجل $T = 0$ نحصل عليها بوضع $\mu = 0$.

لنلاحظ أن تطلب $\frac{1}{e^{-\frac{\mu}{T}}-1} \underset{T\to 0}{\to} \infty$ يعني أن $\frac{\mu}{T} \underset{T\to 0}{\to} 0$ أي أن μ تتناهى نحو الصفر مثل T^r حيث $r > 1$.

نحسب كثافة الغاز (3.17) من أجل درجة حرارة $T < T_0$ $(\mu = 0, \varepsilon \neq 0)$ ونكتب $N_{\varepsilon>0} = d \cdot V$:

$$N_{\varepsilon>0} = \frac{gVm^{3/2}T^{3/2}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}\int\frac{\sqrt{z}}{e^z - 1}dz \qquad (3.20)$$

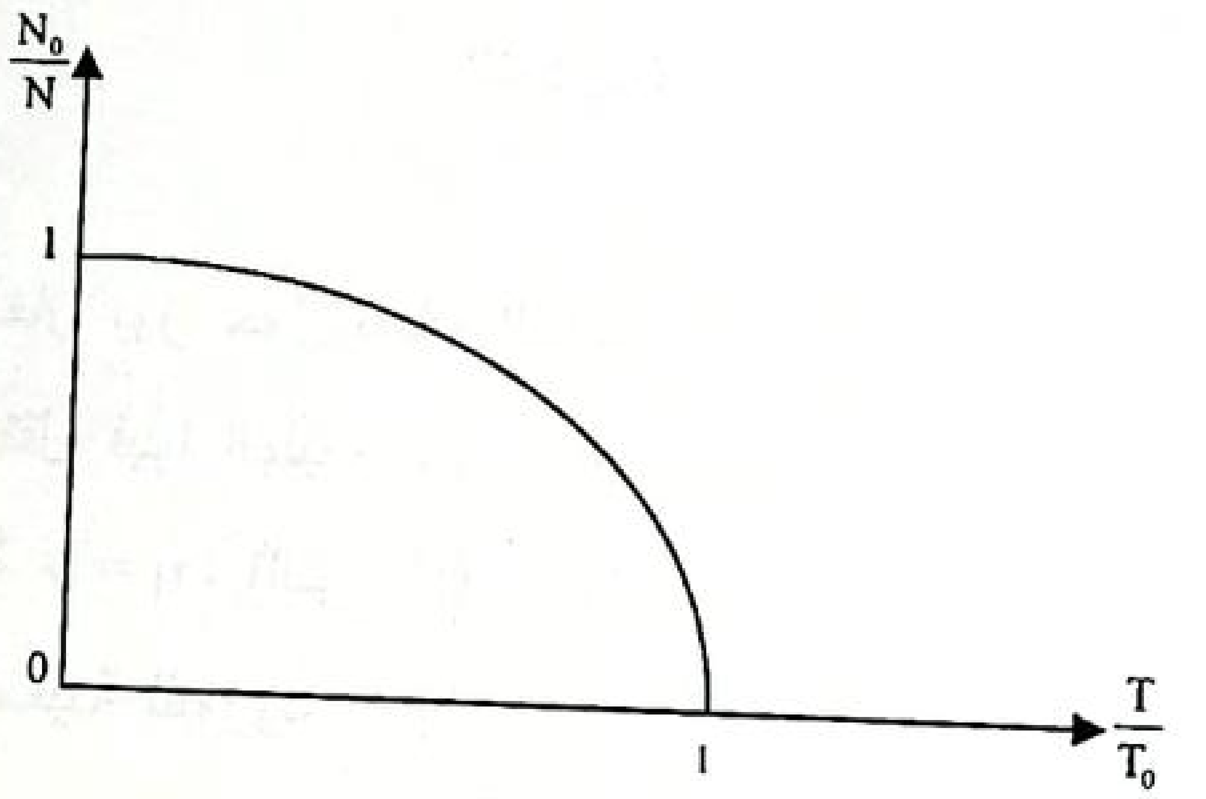
ونقارنها مع الكثافة الكلية المعطاة بـ (3.18) فنجد أن

$$\frac{N_{\varepsilon>0}}{N} = \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2}$$

ومنه عدد البوزونات الواقعة في حالة القاع في درجة الحرارة T

$$N_{\varepsilon=0} = N - N_{\varepsilon>0} = N\left(1 - \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2}\right) \qquad (3.21)$$

لا يوجد أي بوزون في حالة القاع عندما تكون درجة الحرارة $T \geq T_0$ يبدأ تكاثف البوزونات في حالة القاع بانخفاض درجة الحرارة عن T_0 إلى أن يتكثف كلياً في درجة الحرارة $T = 0$ ولدينا منحني التكثف، الشكل.5



الشكل.5

لنحسب الآن طاقة النظمة عندما تكون $T < T_0$، لا يدخل في الحساب إلا الطاقات المختلفة عن الصفر، لدينا من (3.20)

$$E = \int_0^\infty \varepsilon dN_{\varepsilon>0} = \frac{gVm^{3/2}T^{3/2}T}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}\int\frac{z^{3/2}}{e^z - 1}dz$$

والتكامل هو $\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)\zeta\left(\frac{5}{2}\right)$ (انظر ملحق الفصل الأول)؛ نجد إذاً

$$E = \frac{3}{4}\sqrt{\pi}\zeta\left(\frac{5}{2}\right)gVT\frac{m^{3/2}T^{3/2}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3} = \frac{3}{2}\zeta\left(\frac{5}{2}\right)gVT\left(\frac{mT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \qquad (3.22)$$

نحسب المقدار $\frac{m}{2\pi\hbar^2}$ بدليل T_0 في (3.18) حيث التكامل هو $\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\zeta\left(\frac{3}{2}\right)$

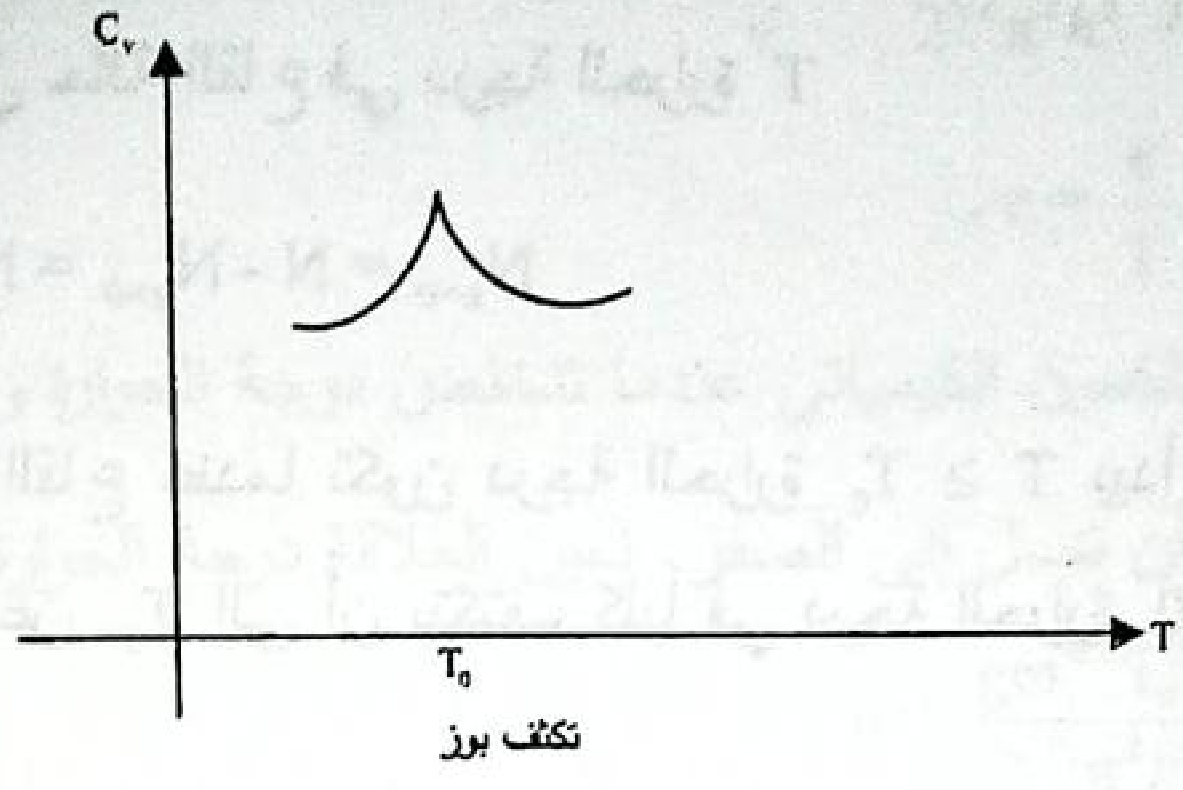
$$\frac{m}{2\pi\hbar^2} = \frac{1}{T_0}\left(\frac{d}{g\zeta(3/2)}\right)^{2/3}$$

وأخيراً

$$E = \frac{3}{2}TN\frac{\zeta(5/2)}{\zeta(3/2)}\left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2} = 0{,}770\,TN\left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2} \qquad (3.22)'$$

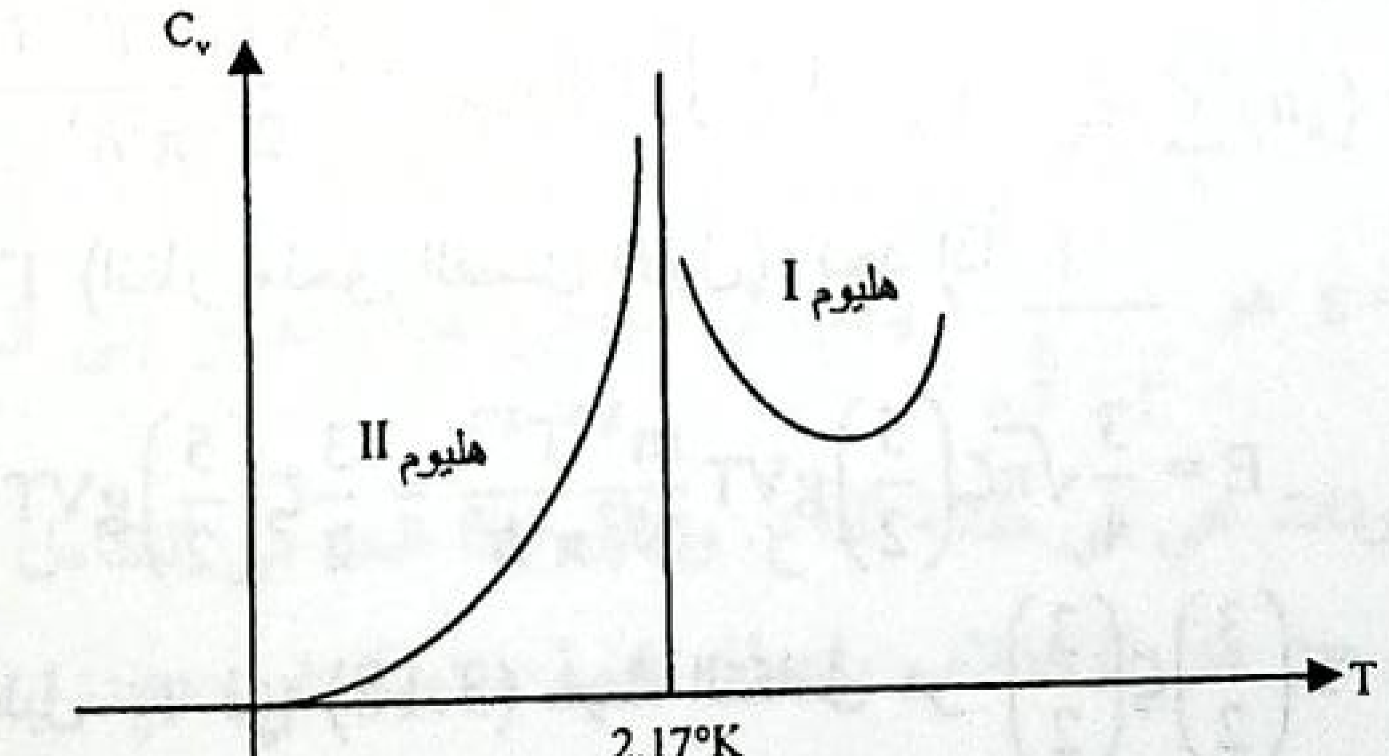
ومنه الحرارة النوعية المتناسبة مع $T^{3/2}$، $C_V = \frac{\partial E}{\partial T}$

$$C_V = \frac{5}{2}\frac{E}{T} \qquad (2.23)$$



الشكل.6

يشبه سلوك الحرارة النوعية لغاز بوز حول نقطة التكثف T_0 سلوك الهليوم المائع حول النقطة λ وهي النقطة $\lambda = 2{,}17°K$ التي ينتقل فيها الهليوم السائل ^4He من الطور المائع (النوع I) إلى الطور فائق السيولة، حيث معامل اللزوجة $\eta = 0$، (النوع II)، الشكل.7، وهو انتقال طور من النوع الثاني كما نعلم. كما أن T_0 من أجل كثافة معينة للبوزونات $\left(T_0 \sim d^{2/3}\right)$ قريبة جداً من النقطة λ. أدى هذا التشابه بلانداو إلى تخمين أن تكون بعض انتقالات الطور للهليوم المائع تكثفاً. ولكن النتائج العددية المحسوبة اعتماداً على هذا التخمين لا تتفق دوماً مع النتائج التجريبية وهو أمر طبيعي لأن الهليوم المائع أبعد ما يكون عن الغاز الكامل فهو وسط كثيف جداً تتفاعل جسيماته بقوة فيما بينها؛ ومع ذلك فإن هناك نوعاً من تكثف بوز–آنشتاين، الشكل.7.



الشكل.7

نرى بمكاملة C_V آخذين بعين الاعتبار العلاقتين السابقتين أن المقدار المكامل متناسب مع $T^{1/2}$ ومنه

$$S = \int \frac{C_V}{T} dT = \int \frac{5E}{2T^2} dT = \frac{5E}{3T} \quad (3.24)$$

وطاقة هيلمهولتز الحرة

$$F = E - TS = -\frac{2}{3}E \quad (3.25)$$

وهي نتيجة طبيعية لأن $\mu = 0$:

$$F = \phi - PV = N\mu + \Omega = \Omega$$

ومنه قيمة F حسب '(2.32) $PV = \frac{2}{3}E$.

لدينا كذلك قيمة الضغط P من (3.25) و'(3.22)

$$P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = 0{,}0851\, g \frac{m^{3/2}T^{5/2}}{\hbar^3} \quad (3.26)$$

وهكذا فالضغط متناسب مع $T^{5/2}$ في منطقة التكاثف، $T < T_0$، وغير تابع للحجم. وهذا ناتج لكون البوزونات في حالة القاع $(\varepsilon = 0)$ غير ذات اندفاع ولا تسهم في الضغط. إن كل المقادير الترموديناميكية متصلة في النقطة $T = T_0$، لكن مشتق الحرارة النوعية بالنسبة للزمن يحدث قفزة في النقطة T_0 يمكن حسابها بدون صعوبة تذكر[4] لنجد أن قيمتها من أجل $T = T_0$ هي $2{,}89\frac{N}{T_0}$ ومن أجل $T = T_0 + 0$ هي $-0{,}77\frac{N}{T_0}$.

3.3– الإشعاع الأسود

أعرنا في المجلد الثاني اهتماماً خاصاً بإشعاع الجسم الأسود، ذلك أن قوانين هذا الإشعاع، ككل قوانين الترموديناميك التقليدي، هي قوانين تجريبية سعى بولتزمان وماكسويل إلى وضع أسس نظرية لها تعتمد على الميكانيك الإحصائي التقليدي. وقد نجح هذا المسعى نجاحاً كبيراً ولكنه فشل في مجالين، أحدهما مسألة الحرارة النوعية التي عالجناها في الفصل الأول وثانيهما إشعاع الجسم الأسود أو الإشعاع الأسود اختصاراً. يفسر الأخذ بعين الاعتبار للطابع الموجي للإشعاع في قوانين الترموديناميك جل قوانين الإشعاع الأسود التجريبية، كقوانين كيرشوف وقانون ستيفان–بولتزمان الذي يحدد تناسب الاستطاعة المشعة الكلية R (اللمعان) مع T : $R = \sigma T^4$ ويحدد بدقة قيمة الثابتة σ، ولكنه يفضي إلى كارثة ما تحت البنفسجي عندما يطبق قانون فين التجريبي على التواترات العالية (ν كبيرة). وهذا ما أدى كما بينا

[4] انظر لاندو–ليفشيتس سابق الذكر، مسألة الفقرة 59.

في (II.3.§4) إلى إدخال ثابتة كونية جديدة، ثابتة بلانك، إلى تكميم طاقة الحقل $E = h\nu$ وإلى ولادة الميكانيك الكمومي الذي يشمل الميكانيك التقليدي كتقريب أولي له $(h \to 0)$ كما يقبل الميكانيك الإحصائي الكمومي، توزع فيرمي–ديراك وبوز آنشتاين، الميكانيك الإحصائي التقليدي، توزع ماكسويل وبولتزمان كتقريب أولي.

لننظر إذاً إلى تجويف مغلق خاو رفعت درجة حرارة جدرانه إلى الدرجة T. تحدث تيارات الجسيمات المشحونة الموجودة في الجدران والمتحركة بفعل الحرارة، حقولاً كهرطيسية عشوائية في التجويف، وفي المقابل تحرض الحقول الكهرطيسية الموجودة في التجويف تيارات في الجدران متخلية عن جزء من طاقتها إلى الجسيمات المشحونة. وهكذا يحدث توازن ترموديناميكي بين غاز الفوتونات – الجسيمات المكونة للحقل الكهرطيسي – والمادة المكونة لجدران التجويف. إن سبين الفوتون يساوي 1 ومن جهة أخرى فإن الفوتونات لا تتفاعل فيما بينها نظراً لخطية معادلات الكهرطيسية المعبرة عن مبدأ التوضيع. وهكذا فإن الفوتونات هي غاز بوزوني كامل. يتميز هذا الغاز المتوازن مع جدران التجويف بتغير عدد جسيماته N نظراً لتبادل الفوتونات بين التجويف ومادة الجدران دون انقطاع وبما أن الكمون الكيميائي μ هو عمل يتطلبه اقتلاع جسيم من النظمة ولما كانت طاقة النظمة ثابتة نظراً للتوازن الترموديناميكي فإن طاقة هيلمهولتز الحرة أصغرية و $\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V} = 0$. وهكذا فإن توزع بوز–آنشتاين للفوتونات عندما تكون طاقة الفوتون $\varepsilon_i = \hbar\omega_i$ هو

$$n\langle\varepsilon_i\rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_i}{T}} - 1} \tag{3.27}$$

هذا هو توزع بلانك للإشعاع الأسود؛ إنه في الوقت ذاته توزع الهزاز التوافقي : وهو أمر طبيعي فقد بينا مرات عديدة أن الحقل الكهرطيسي يكافئ من وجهة النظر الرياضية عدداً غير عدود من الهزازات التوافقية؛ فمعادلة الموجة (معادلة كل مركبة من الكمون الكهرطيسي رباعي الأبعاد) هي

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2\right)A_i = 0$$

وتأخذ في حالة الأمواج المستوية

$$A_i = a_i e^{-i(\omega t - k\bar{r})} = A_i(t)e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}$$

الشكل

$$\ddot{A}_i + c^2k^2A_i = 0$$

أو

$$k^2 - \frac{\omega^2}{c^2} = 0$$

في (II.3.§4) إلى إدخال ثابتة كونية جديدة، ثابتة بلانك، إلى تكميم طاقة الحقل $E = h\nu$ وإلى ولادة الميكانيك الكمومي الذي يشمل الميكانيك التقليدي كتقريب أولي له $(h \to 0)$ كما يقبل الميكانيك الإحصائي الكمومي، توزع فيرمي–ديراك وبوز آنشتاين، الميكانيك الإحصائي التقليدي، توزع ماكسويل وبولتزمان كتقريب أولي.

لننظر إذاً إلى تجويف مغلق خاو رفعت درجة حرارة جدرانه إلى الدرجة T. تحدث تيارات الجسيمات المشحونة الموجودة في الجدران والمتحركة بفعل الحرارة، حقولاً كهرطيسية عشوائية في التجويف، وفي المقابل تحرض الحقول الكهرطيسية الموجودة في التجويف تيارات في الجدران متخلية عن جزء من طاقتها إلى الجسيمات المشحونة. وهكذا يحدث توازن ترموديناميكي بين غاز الفوتونات – الجسيمات المكونة للحقل الكهرطيسي – والمادة المكونة لجدران التجويف. إن سبين الفوتون يساوي 1 ومن جهة أخرى فإن الفوتونات لا تتفاعل فيما بينها نظراً لخطية معادلات الكهرطيسية المعبرة عن مبدأ التوضيع. وهكذا فإن الفوتونات هي غاز بوزوني كامل. يتميز هذا الغاز المتوازن مع جدران التجويف بتغير عدد جسيماته N نظراً لتبادل الفوتونات بين التجويف ومادة الجدران دون انقطاع وبما أن الكمون الكيميائي μ هو عمل يتطلبه اقتلاع جسيم من النظمة ولما كانت طاقة النظمة ثابتة نظراً للتوازن الترموديناميكي فإن طاقة هيلمهولتز الحرة أصغرية و $\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V} = 0$. وهكذا فإن توزع بوز–آنشتاين للفوتونات عندما تكون طاقة الفوتون $\varepsilon_i = \hbar\omega_i$ هو

$$n\langle\varepsilon_i\rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_i}{T}} - 1} \qquad (3.27)$$

هذا هو توزع بلانك للإشعاع الأسود؛ إنه في الوقت ذاته توزع الهزاز التوافقي : وهو أمر طبيعي فقد بينا مرات عديدة أن الحقل الكهرطيسي يكافئ من وجهة النظر الرياضية عدداً غير عدود من الهزازات التوافقية؛ فمعادلة الموجة (معادلة كل مركبة من الكمون الكهرطيسي رباعي الأبعاد) هي

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2\right)A_i = 0$$

وتأخذ في حالة الأمواج المستوية

$$A_i = a_i e^{-i(\omega t - k\bar{r})} = A_i(t)e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}$$

الشكل

$$\ddot{A}_i + c^2k^2A_i = 0$$

أو

$$k^2 - \frac{\omega^2}{c^2} = 0$$

مع الشروط على الحدود $\vec{k} = \frac{\pi}{L}\vec{n}$ حيث L أبعاد التجويف الذي يقع فيه الإشعاع. لنكتب عدد الاهتزازات الخاصة في واحدة الحجوم في الإحداثيات الكروية $(p = \hbar k)$

$$\frac{g d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{g d\vec{k}}{(2\pi)^3} = \frac{g 4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3} = \frac{2\omega^2 d\omega}{2\pi^2 c^3}$$

حيث $g = 2$ تدني سبين الفوتون[5]، أو اتجاها الاستقطاب العرضانيان. إن عدد الفوتونات في كل الحجم التي تقع تواتراتها بين ω و $\omega + d\omega$ هو

$$dN_\varepsilon = \frac{V}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^2}{e^{\frac{\hbar\omega}{T}} - 1} d\omega \qquad (3.28)$$

وعدد الفوتونات الوسطي هو تكامل هذا المقدار بأخذ علاقات ملحق الفصل الأول (17) و(21) بعين الاعتبار

$$N = 0{,}244\left(\frac{T}{\hbar c}\right)^3 V \qquad (3.28)'$$

والطاقة الكلية هي

$$E = \int_0^\infty \hbar\omega dN_\omega d\omega = \int_0^\infty dE_\omega = \int \frac{V\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{T}} - 1} d\omega \qquad (3.29)$$

نكتب dE بدليل طول الموجة $\lambda = Tc = \frac{2\pi}{\omega}c$ (حيث T هو دور الموجة في هذه العلاقة) على الشكل الذي أعطاه بلانك عام 1900

$$dE_\lambda = \frac{16\pi^2 c\hbar V}{\lambda^5} \frac{d\lambda}{e^{\frac{2\pi\hbar c}{T\lambda}} - 1}$$

نكتب المخرج في توزع بوز–آنشتاين عندما تكون الطاقة $\hbar\omega$ صغيرة أمام T على الشكل $1 + \frac{\hbar\omega}{T} - 1$، وتصبح كثافة الطاقة عندئذ

$$dE_\omega = V\frac{T}{\pi^2 c^3}\omega^2 d\omega \qquad \hbar\omega << T \qquad (3.30)$$

إنها صيغة ريلي–جينز التي تنطبق على قانون فين $u = \frac{\nu^2 T}{c^3}\Pi$ ((II.(3.(4.18)) حيث u كثافة الطاقة في واحدة الحجوم و Π الثابتة الكونية (المستقلة عن درجة الحرارة وعن الإشعاع وعن مادة تجويف الجدران) التي وضعها ريلي مساوية لـ 8π. نحصل على هذه الصيغة أيضاً عندما ننظر إلى الحقل

---

[5] تجدر الإشارة هنا أنه يستحيل تصور نظمة محاور مرتبطة بجسيم معدوم الكتلة، يسير بالضرورة بسرعة الضوء، ولا يمكن بالتالي الكلام عن مسقط السبين $S = 1$، على أحد هذه المحاور المساوي لـ 1+، 0، 1-. أو بعبارة أخرى لا توجد نظمة محاور تحدد خواص التناظر الدورانية للفضاء الإقليدي وتعين بالتالي انحفاظ العزم الزاوي الصميمي (السبين) – العزم الزاوي الكلي للجسيم وهو في حالة سكون. يبرهن في نظرية الحقول المكممة أن قيمتي السبين هما ±1 في مستو عمودي على اتجاه انتشار الموجة، وهو ما يقابل اتجاهي الاستقطاب في الكهرطيسية التقليدية.

الكهرطيسي كمجموعة من الهزازات التوافقية تملأ حجم التجويف، عددها هو بمكاملة $d\bar{n} = dn_x dn_y dn_z$ على $\frac{1}{8}$ من حجم الكرة $n_x, n_y, n_z > 0$ ،

$$N(k) = g \cdot \frac{1}{8}\frac{4\pi}{3}n^3 = \frac{2}{8}\frac{4}{3}\pi\frac{k^3}{\left(\frac{\pi}{L}\right)^3} = \frac{\pi L^3\omega^3}{3c^3\pi^3} = \frac{V\omega^3}{3c^3\pi^2}$$

ومنه عدد الهزازات التي تتراوح تواتراتها بين ω و $\omega + d\omega$

$$dN(\omega) = \frac{V\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}$$

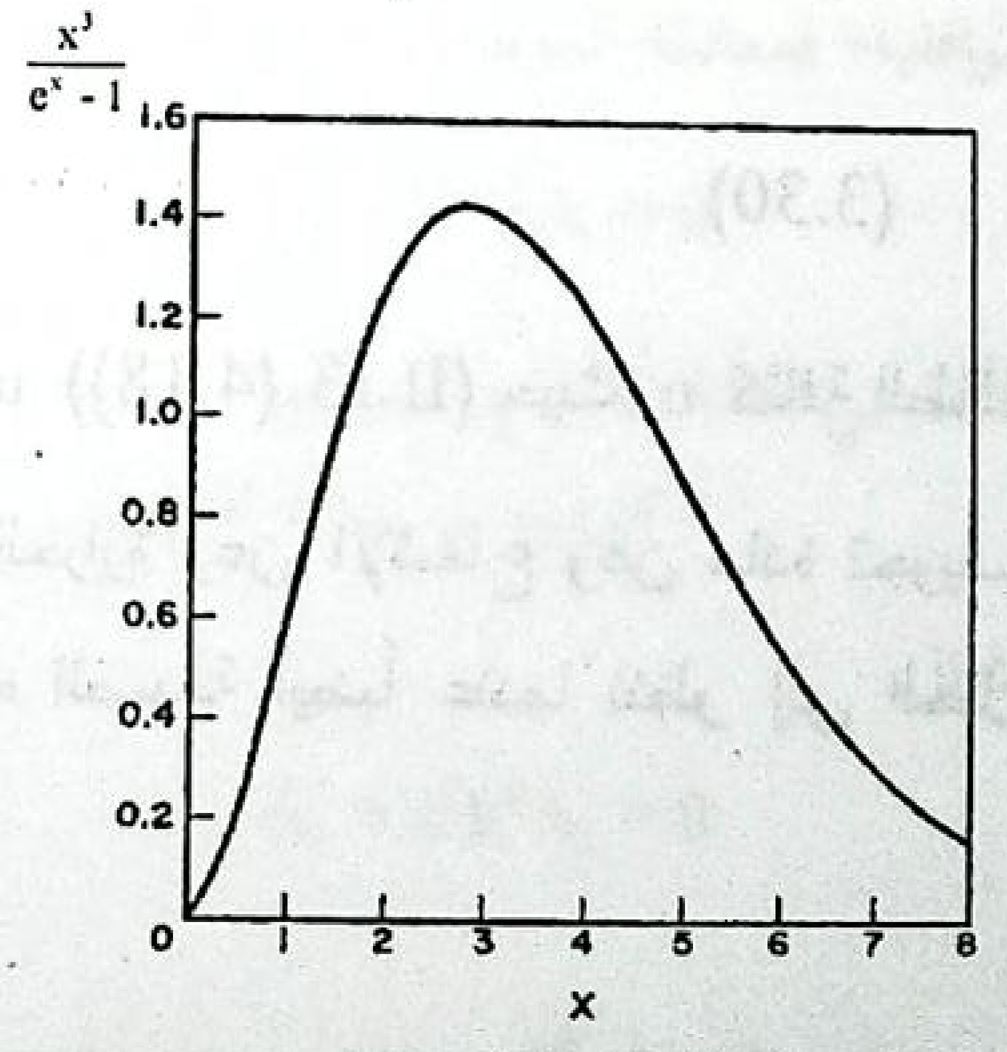
طاقة الهزاز التقليدية حسب مبرهنة التوزع بالتساوي هي T، $\frac{T}{2}$ للطاقة الحركية و $\frac{T}{2}$ للطاقة الكاملة وهذا ما يعيدنا إلى صيغة ريلي-جينز. أما عندما تكون التواترات كبيرة أمام درجة الحرارة فنهمل 1 أمام $e^{\frac{\hbar\omega}{T}}$ في مخرج توزع بوز-آنشتاين ونكتب

$$dE_\omega = \frac{V\hbar}{\pi^2 c^3}\omega^3 e^{-\frac{\hbar\omega}{T}} d\omega \qquad 1 << e^{\frac{\hbar\omega}{T}} \qquad (3.31)$$

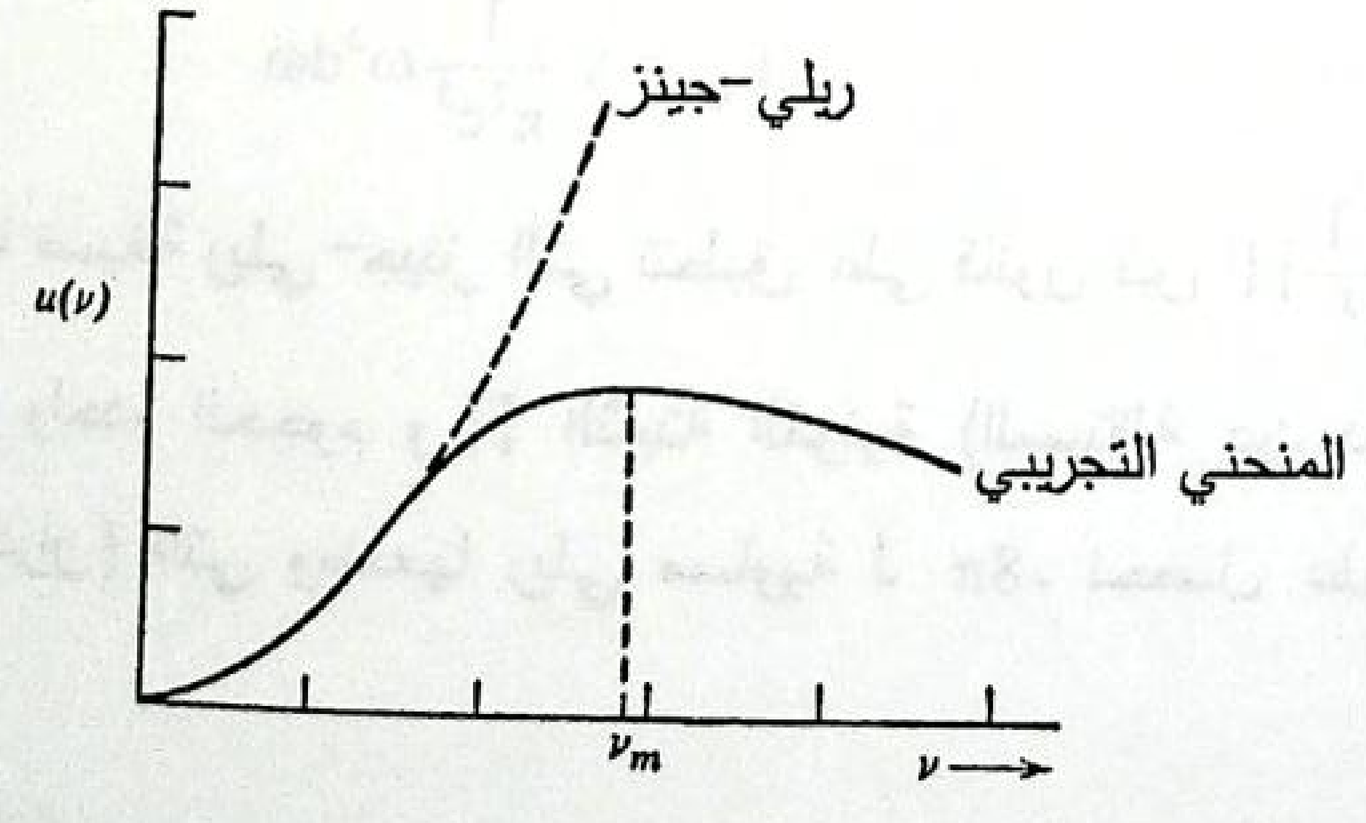
وهذا هو قانون اقترحه فين عام 1896 بشكل تجربي لكي تنطبق نتائج القياس التي قام بها في هذا المجال من الطيف مع هذا القانون.

إن كلا الصيغتين (3.30) و (3.31) صيغتان تقليديتان، تختفي في الصيغة الأولى ثابتة بلانك المميزة للميكانيك الكمومي كلياً، وتقبل الأخرى إحصاء بولتزمان $\sim e^{-\frac{E}{T}}$ ولكن بطاقات مكممة.

إن توزع بلانك لكثافة الطاقة هو من الشكل $\frac{x^3}{e^x - 1}$، الشكل.8a، في حين أن توزع ريلي-جينز قطعي مكافئ (متناسب مع x^2) ينطبق على توزع بلانك من أجل التواترات الصغيرة ولكنه يبتعد عنه بعدها مسبباً كارثة تحت البنفسجي، الشكل.8b.

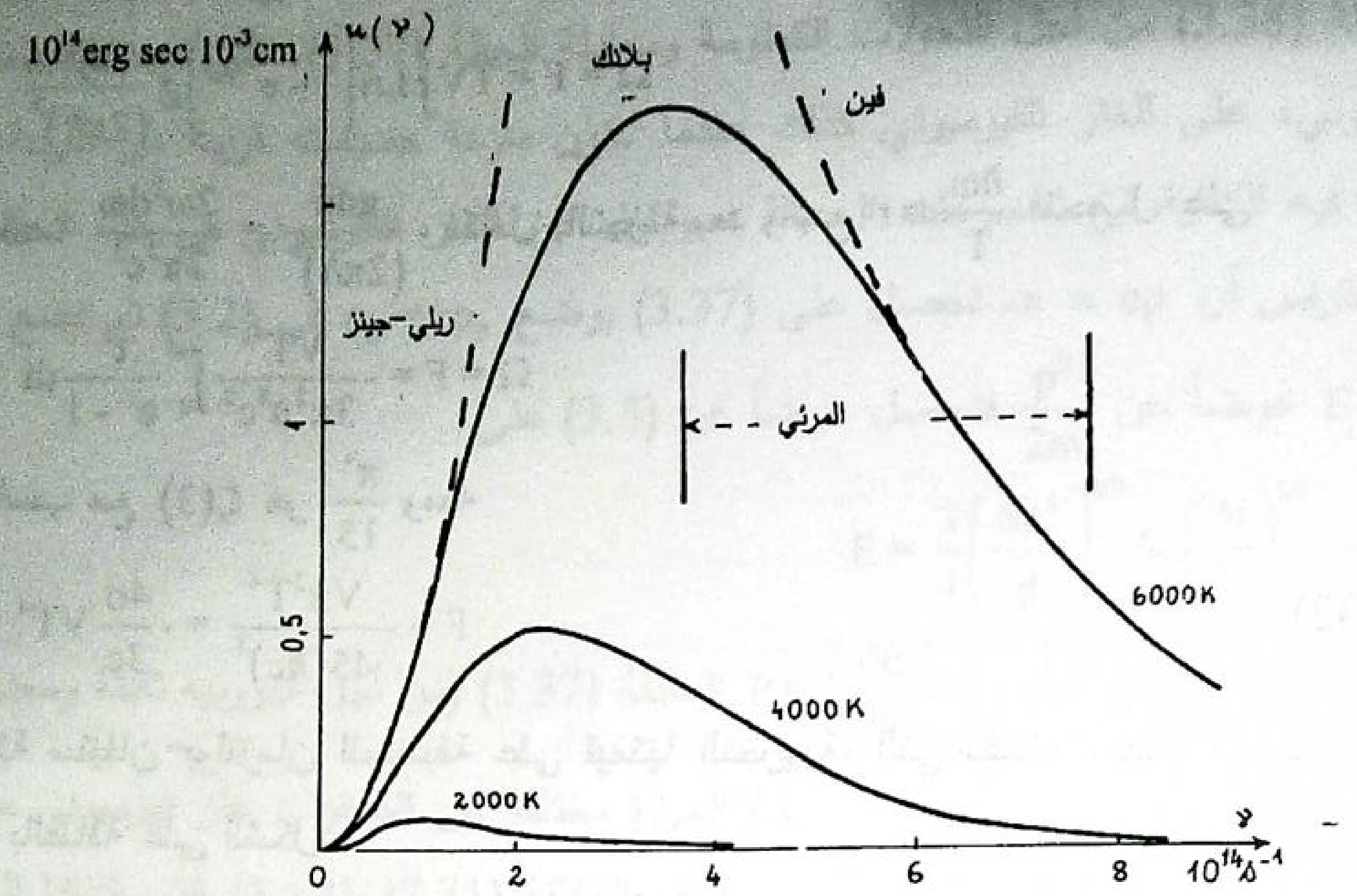


الشكل.8a



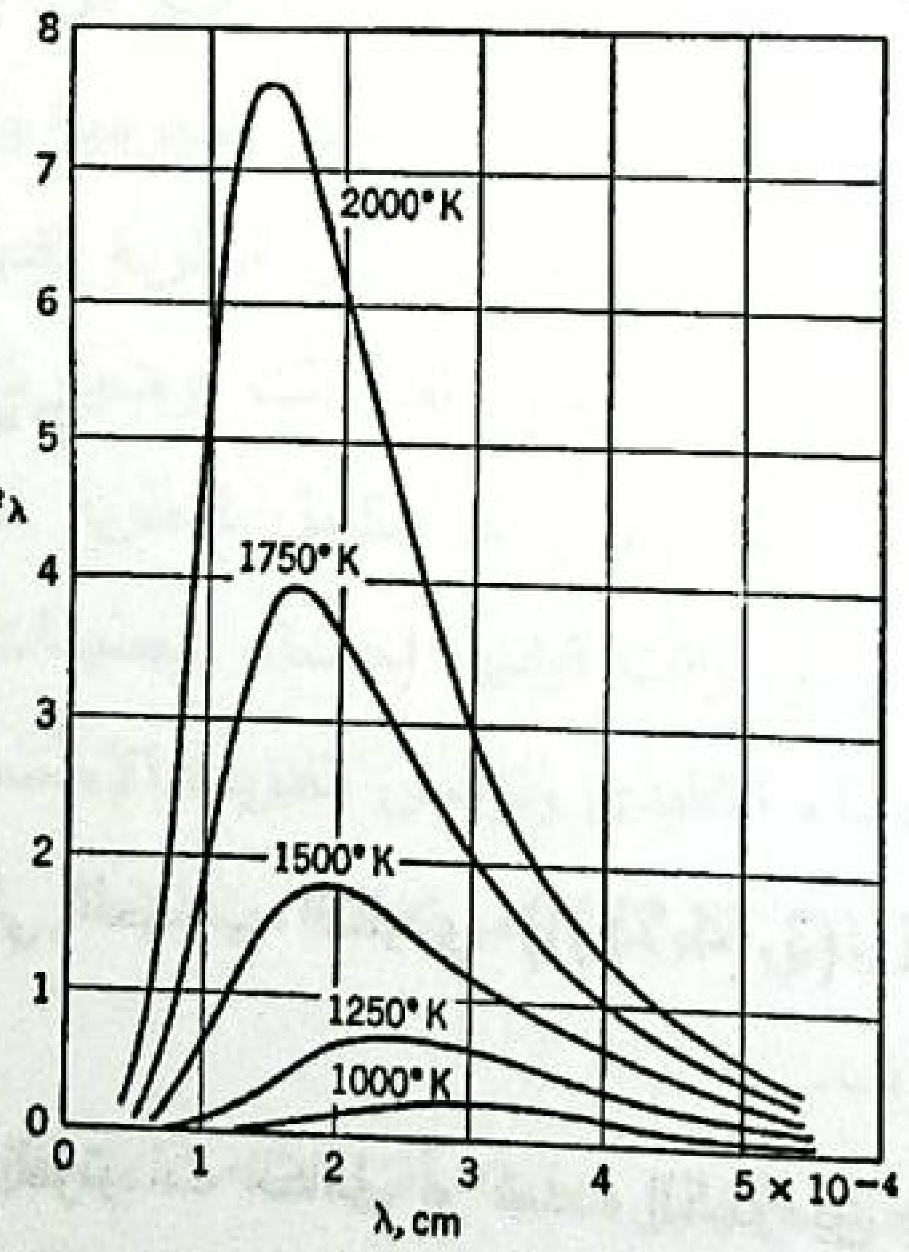
الشكل.8b

أما قانون فين فينطبق على توزع بلانك من أجل التواترات العالية، الشكل.9.



الشكل.9

لكثافة الطاقة في توزع بلانك نهاية عظمى نحصل عليها بإيجاد حل عددي لدالة متسامية وهي $x = \frac{\hbar\omega_m}{T} = 2,822$. وهكذا فإن نسبة النهايات العظمى إلى درجات الحرارة ثابتة $\frac{\omega_{m_1}}{T_1} = \frac{\omega_{m_2}}{T_2}$ ونحصل على قانون انزياح فين. لدينا من أجل $T_2 > T_1$، $\omega_{m_2} > \omega_{m_1}$ وبالتالي $\lambda_{m_2} < \lambda_{m_1}$ وينزاح الطيف من تحت الأحمر نحو الأحمر بارتفاع درجة الحرارة، الشكل.10.



الشكل.10

نحسب الكمون الترموديناميكي الكبير Ω المطابق لكمون هيلمهولتز نظراً لأن $\mu = 0$؛ لدينا من (2.21)

$$\Omega = F = TV\int Ln\left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{T}}\right) g\frac{d\bar{p}}{(2\pi\hbar)^3}$$

نكتبه بدليل ω : $\frac{gd\bar{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{2\omega^2 d\omega}{2\pi^2 c^3}$، نكامل بالتجزئة بعد وضع $t = \frac{\hbar\omega}{T}$ فنحصل على

$$\Omega = F = -\frac{VT^4}{3\pi^2\hbar^3c^3}\int_0^{\infty}\frac{t^3}{e^t - 1}dt$$

التكامل المتناسب مع $\zeta(3)$ هو $\frac{\pi^4}{15}$ ومنه

$$F = -\frac{V\pi^2T^4}{45(\hbar c)^3} = -\frac{4\sigma}{3c}VT^4 \qquad (3.32)$$

حيث σ ثابتة ستيفان-بولتزمان المنطبقة على قيمتها التجريبية، التي نكتبها عندما نحسب T بدرجة الحرارة وليس بالطاقة على الشكل

$$\sigma = \frac{\pi^2k^4}{60\hbar^3c^2} = 5,67\cdot10^{-8} = \frac{\text{وات}}{\text{متر مربع}\cdot(°K)^4}$$

نحسب الأنتروبية المتناسبة مع مكعب درجة الحرارة

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = \frac{16\sigma}{3c}VT^3 \qquad (3.33)$$

وطاقة الإشعاع الكلية، من $E = F + TS$،

$$E = \frac{4\sigma}{c}VT^4 = -3F \qquad (3.34)$$

وهو قانون بولتزمان. ثم حرارة الإشعاع النوعية

$$C_V = \frac{16\sigma}{c}VT^3 \qquad (3.35)$$

وأخيراً الضغط من (3.32)

$$P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = \frac{4\sigma}{3c}T^4 \qquad (3.36)$$

ومنه

$$PV = \frac{E}{3} \qquad (3.37)$$

وهي النتيجة التي حصلنا عليها في الحساب التقليدي (((II.(3.(4.7)') نظراً لأن طاقة الفوتون هي $\varepsilon = pc$.

ومن جهة أخرى فإن انضغاط غاز الفوتونات الكامل أو تمدده الكظومين يقعان في أنتروبية ثابتة، أي أن VT^3 ثابتة و V متناسبة مع T^{-3}، نستبدل T^4 في تعبير الطاقة بـ $V^{-4/3}$ ونحصل من (3.37) على

$$PV^{4/3} = \text{ثابتة} \qquad (3.38)$$

ملاحظة هامة :

تصح العلاقة (3.38) من أجل التحولات الكظومة ومعادلة الحالة (3.37)، التي برهنا عليهما من أجل الغاز البوزوني، على الغاز الفيرميوني كذلك عندما تكون سرعة جسيماته قريبة من سرعة الضوء – مسرعة بما فيه الكفاية في المسرعات الحديثة – ونقول عن الغاز الفيرميوني في هذه الحالة إنه فوق النسبوي ونفترض أن $\varepsilon \simeq cp$. نحصل على (3.37) بوضع $\varepsilon_0 = cp_0$ في (3.2) ثم نضع هذه القيمة في صيغة E عوضاً عن $\frac{p^2}{2m}$ فنحصل عوضاً عن (3.5) على

$$E = \frac{3}{4}\left(\frac{6\pi^2}{g}\right)^{1/3} \hbar c \left(\frac{N}{V}\right)^{1/3}$$

تعطينا هذه العلاقة بكتابة $P = \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_s = \frac{E}{3V}$ العلاقة (3.37) (من أجل أنتروبية ثابتة ومعدومة). وهي علاقة صحيحة أيضاً حتى عندما تصبح درجة الحرارة مختلفة عن الصفر : غاز فيرميوني متدني وفوق نسبوي. يكفي للتحقق من ذلك استبدال ε بـ cp في العلاقة (2.31) $(\xi = 1)$ التي قادتنا إلى '(2.32) لنجد أن (3.37) تحل محلها.

لا يطرأ على مفاهيم وقوانين امتصاص وإصدار الإشعاع الأسود التي عرضناها في (((§4.5).3).II) أي تغيير ماعدا استبدال الاستطاعة $\frac{u(\nu,T)}{4\pi}c$ بـ

$$ce_0 = \frac{1}{4\pi V}\frac{dE_\omega}{d\omega} = c\frac{\hbar\omega^3}{4\pi^3 c^3\left(e^{\frac{\hbar\omega}{T}} - 1\right)} \qquad (3.39)$$

يوضح إشعاع الجسم الأسود بجلاء لا نظير له كيفية الانتقال من علم تجربي بحت، الترموديناميك التقليدي، إلى علم نظري يحدد المفاهيم ويستنبط القوانين التجريبية بشكل متسق من أسس الميكانيك الإحصائي. ثم يبين كيفية نشوء مفاهيم جديدة حينما تفشل النظرية القديمة في تفسير بعض الظواهر أو حينما تستنبط قوانين لا تتفق مع الواقع التجريبي. لقد حلت فرضية بلانك (1900) مشكلة قانون فين ووضعت اللبنة الأولى في ميكانيك الكم الذي لم يتكامل كنظرية متسقة إلا بعد ربع قرن من هذا الانطلاق، كما رأينا في المجلد الرابع. وأتت قوانين إحصاء الجسيمات الكمومية بسرعة فائقة بعد ذلك (1926) لتحل محل قوانين الإحصاء التقليدي وتؤسس الفيزياء الإحصائية. يبين، الشكل.9، كمثال رائع فعلاً أن الإطار النظري الجديد لا يلغي القوانين المستنبطة من الإطار النظري السابق وإنما يقبلها كتقريب أولي له ينطبق على بعض الظروف.

لننظر أخيراً إلى الإشعاع خارج حالة التوازن، طيفه واتجاهاته لا تنطبق على توزع طيف التوازن أو توزع الاتجاهات المتجانس. ولتكن $e(\omega,\vec{n})d\omega d\Omega$ كثافة هذا الإشعاع في مجال التواترات $d\omega$ وعنصر الزاوية المجسمة $d\Omega$، حيث $\vec{n}$ المتجهة الواحدية في اتجاه متجهة الموجة. نحسب درجة حرارة الإشعاع

من أجل كل اتجاه $\bar{n}$ مفترضين أن كثافة الإشعاع هي العلاقة التي تحددها (3.39) $e(\omega, \bar{n}) = e_0(\omega)$.

نحصل من (3.39) على درجة الحرارة

$$T_{\omega,\bar{n}} = \frac{\hbar\omega}{\mathrm{Ln}\left(1 + \dfrac{\hbar\omega^3}{4\pi^3c^3} \cdot \dfrac{1}{e(\omega, \bar{n})}\right)} \tag{3.40}$$

بكتابة

$$\frac{\hbar\omega}{T} = \mathrm{Ln}e^{\frac{\hbar\omega}{T}} = \mathrm{Ln}\left[1 + \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^3c^3e_0}\right].$$

لنفرض أن الجسم الأسود يشع في الخلاء المحيط به؛ ينتشر الإشعاع على شكل خطوط مستقيمة وهو خارج حالة التوازن الترموديناميكي. ولما كان انتشار الفوتونات في الخلاء، وهي غير متفاعلة فيما بينها، فمن الممكن تطبيق مبرهنة ليوفيل على دالة توزع الفوتونات في فضاء طور تحدده أوضاع الفوتونات ومتجهات موجاتها، أي أننا نطبق الضوء الهندسي في هذه الحالة. فالتوزع ثابت على المسارات في هذا الفضاء وتنطبق دالة التوزع – مقاس معامل تابع للتواتر – على كثافة الإشعاع ذات التواتر ω والاتجاه $\bar{n}$ والوضع $\bar{r}$ $e(\omega, \bar{n}, \bar{r})$. يبقى التواتر ثابتاً طبعاً أثناء الانتشار، وهكذا فإن كثافة الإشعاع هذه تساوي كثافة الإشعاع التي يصدرها الجسم الأسود $e_0(\omega)$، والفرق بينهما هو أن هذه الكثافة هي نفسها في كل الاتجاهات في حالة التوازن الترموديناميكي في حين أنها تختلف بين اتجاه وآخر هنا. أو بعبارة أخرى فإن حرارة الإشعاع T خارج التوازن المعرفة بـ (3.40) تساوي، في نقطة محددة في الفضاء، حرارة إشعاع الجسم الأسود T_0 الذي يصدره في كل الاتجاهات التي ينتشر فيها هذا الإشعاع. إلا أنه من الضروري الملاحظة أن كل نقطة من عنصر سطح ما في الخلاء تمتص طاقة هي $e_0(\omega, T_0)A(\omega, T, \theta, \varphi)$ وأن الطاقة الكلية الممتصة هي الطاقة التي يعاد إصدارها، أي أن

$$\int e_0(\omega, T_0)A(\omega, T, \theta, \varphi)dS\cos\theta d\Omega = \int e_0(\omega, T)A(\omega, T, \theta, \varphi)dS'\cos\theta d\Omega'$$

T_0 هي درجة حرارة الجسم الأسود و A معامل امتصاص السطح. إن $dS'd\Omega'$ أكبر بكثير من $dSd\Omega$ وبالتالي فإن $T << T_0$. لكن هذا لا يمنع من تركيز الإشعاع بالاستعانة بمرايا وعدسات ورفع درجة حرارة الإشعاع في نقطة التركيز دون أن تتجاوز بطبيعة الحال درجة حرارة الجسم الأسود المشع.

4. الغاز الإلكتروني في المعادن

1.4– متجهة حالة الغاز الإلكتروني

إن دراسة حركة الإلكترونات في المعادن بالغة التعقيد، إذ إن للمعدن بنية بلورية تحتل الإيونات مواقع محددة فيها وتخضع لحركات اهتزازية حول هذه المواقع، درسنا أحد نماذجها في دراسة الحرارة النوعية للجسم الصلب في الفصل الأول. وتحدث الإيونات، كل إيون في موقعه، كمونات دورية تجذب الإلكترونات، إلا أن تفاعل الإلكترونات مع هذه المراكز الجاذبة يختلف باختلاف بعدها عن نواة الذرة التي تنتمي إليها ويتراوح الكمون بين $\frac{-Ze}{r}$ عندما يكون الإلكترون قريباً من النواة، Z شحنة النواة و r بعد الإلكترون عنها و $\frac{-e}{r}$ عندما يكون بعيداً عنها بحيث تحدث إلكترونات الذرة الأخرى حاجزاً بين النواة والإلكترون المذكور. وهذا ما دفعنا إلى إدخال مفهوم الحقل المتسق ذاتياً في (((§2.3)،6)،IV) لدراسة مفعول هذا التفاعل. ثم إن الإلكترونات تتفاعل فيما بينها زوجاً زوجاً والكمون الحاصل في النقطة $\vec{r}_i$ حيث الإلكترون i هو $\sum_{l=j\neq i}^{Z-1} \frac{e}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$، $\vec{r}_j$ وضع كل من إلكترونات الذرة (Z - 1) الأخرى وهو المفعول الذي درسناه في تقريب هارتري في الفصل السابع من كتاب ميكانيك الكم.

أضف إلى ذلك تفاعل الإلكترونات المغنطيسي الناتج عن عزمها المداري وعن سبينها. هذا عندما ننظر إلى إلكترونات ذرة واحدة. أما عندما تتعدد الذرات فلا يمكن إهمال مفعول النويات المجاورة على إلكترون ذرة معينة مما يجعلنا ننظر إلى الإلكترون البعيد عن نواة ذرته – إلكترون التكافؤ – كإلكترون حر تلغي مفاعيل جذب النويات المجاورة له بعضها بعضاً، ماعدا الإلكترونات الواقعة على سطح المعدن التي تبقى مشدودة إليه ما لم توجد قوى خارجية تقتلعها عن السطح. لنشر أنه لا يمكن فهم مفعول النويات المجاورة – الكمون الدوري المجاور – إلا في إطار ميكانيك الكم لأن هذا المفعول هو مفعول اجتياز حاجز كمون، مفعول نفق. وهو يعني في كل الأحوال أن خواص الإلكترونات في كمون دوري هي أقرب ما تكون إلى خواص الإلكترونات الحرة. وهكذا فإن أبسط هاميلتوني لحركة الإلكترونات هو الهاميلتوني الذي لا يأخذ بعين الاعتبار وجود الحقل الدوري ويعتبر النويات ساكنة ويكتفي بالطاقة الحركية للإلكترونات والطاقة الكامنة لتفاعلاتها. نخصص هذه الفقرة لدراسته على أن ندرس مفعول الحقل الدوري في الفصل القادم

$$H = -\sum_{i=1}^{N} \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \sum_{\substack{i,j \\ i\neq j}} U\left(\vec{r}_i, \vec{r}_j\right) \qquad (4.1)$$

N عدد الإلكترونات في معدن حجمه V و

$$U(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

إن متجهة حالة الإلكترون في الحجم V، ولنفرضه مكعباً طول ضلعه L – حاجز كمون لامتنه ثلاثي الأبعاد – هي كما نعلم من الشكل

$$\psi(\vec{r}) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} \sin\left(n_x \frac{\pi x}{L}\right)\sin\left(n_y \frac{\pi y}{L}\right)\sin\left(n_z \frac{\pi z}{L}\right)$$

وهي حل المعادلة

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2|\psi(\vec{r})\rangle = E|\psi(\vec{r})\rangle$$

المحققة لشرط انعدام $|\psi\rangle$ على جدران الحجم وبالتالي لدورية الحل. تخضع الأمواج المستوية لنفس المعادلة ولكنها لا تحقق هذا الشرط على الحدود. نفرض عليها شروط حدود اصطناعية لا تتفق والواقع الفيزيائي، أن تكون دورية L وأن تأخذ متجهة الموجة القيم $\vec{k} = \frac{2\pi}{L}\vec{n}$ كما فعلنا في دروس ميكانيك الكم: $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$ متجهة تأخذ مركباتها قيماً صحيحة موجبة، $\frac{1}{8}$ من الكرة ذات نصف القطر $|\vec{n}|$ وننتقل من الجمع على $\vec{n}$ إلى التكامل في حالة الموجات المستوية من أجل $|\vec{n}|$ كبيرة بأن نكتب

$$\sum_{n_x, n_y, n_z} \underset{|\vec{n}|\to\infty}{\to} \int d\vec{n} = \int \frac{V}{(2\pi)^3} d\vec{k}$$

والتكامل هنا من أجل كل القيم الموجبة والسالبة لـ k[6].

نكتب إذاً الموجة المستوية التي تحل محل متجهة حالة الجسيم في بئر كمون $\psi(\vec{r})$ والمنظمة للواحد على الشكل

$$u(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (4.2)$$

كما نكتب متجهة حالة النظمة الفيرميونية المؤلفة من N إلكتروناً لا تتفاعل فيما بينها على شكل معين سلاتر (1.9)

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_1(\vec{r}_1)u_1(\vec{r}_2) \ \dots \ u_1(\vec{r}_N) \\ \vdots \\ u_N(\vec{r}_1)u_N(\vec{r}_2) \ \dots \ u_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \quad (4.3)$$

---

[6] تجدر الإشارة إلى اختلاف مضمون هذا الانتقال عن التقريب شبه التقليدي حيث يتحول أثر مصفوفة الكثافة إلى تكامل له نفس الصيغة

$$Tr \underset{\hbar\to 0}{\to} \int \frac{d\vec{r}d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \int \frac{V}{(2\pi)^3} d\vec{k}$$

فالانتقال الأول انتقال كمومي يطبق على أجسام جهرية تلعب الظواهر الكمومية دوراً مميزاً فيها ولا يصح إلا في إهمال تفاعل جسيمات الجسم الجهري فيما بينها، بينما يصح التقريب شبه التقليدي، الذي ينقل إلى فضاء طور تقليدي (تحولت نقاطه إلى خلايا) على جسيمات متفاعلة أياً كان شكل الكمون.

وضعنا $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ للتنظيم للواحد لأن كل موجة مستوية $u(\vec{r})$ منظمة للواحد، كما فعلنا في ($(1.18)_f$).6).IV). لدينا في واقع الأمر

$$\int \bar{\psi}\psi d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N = \langle\psi|\psi\rangle = \langle u_1|\langle u_2|\dots\langle u_N|AA|u_1\rangle|u_2\rangle\dots|u_N\rangle \quad (4.4)$$

$$= \langle u_1\langle u_2|\dots|u_N\rangle\left(A|u_1\rangle|u_2\rangle\dots|u_N\rangle\right)$$

حيث A المؤثر مضاد التناظر، $A^2 = A$. كتبنا كل عنصر من عناصره التي عددها $N!$ على الشكل $I - P_{12}$ حيث P_{12} هو مؤثر الاستبدال : $P_{12}\left[u_1(\vec{r}_1)u_2(\vec{r}_2)\right] = u_1(\vec{r}_2)u_2(\vec{r}_1)$. أي أن عناصر الجداء (4.4) هي إما من الشكل

$$\int \bar{u}_1(\vec{r}_1)\bar{u}_2(\vec{r}_2)\dots\bar{u}_N(\vec{r}_N)u_1(\vec{r}_1)\dots u_N(\vec{r}_N)d\vec{r}_1\dots d\vec{r}_N = 1$$

حيث تشير – إلى المرافق العقدي، وعددها $N!$ أو من الشكل

$$\int \bar{u}_1(\vec{r}_1)\bar{u}_2(\vec{r}_2)\dots u_1(\vec{r}_2)u_2(\vec{r}_1)\dots d\vec{r}_1\dots d\vec{r}_N = 0$$

نظراً لتعامد متجهات القاعدة.

إن مفعول مؤثر الطاقة الحركية $\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla_i^2$ على مؤثر الاستبدال بين u_1 و u_2 (وبين u_i و u_{i+1} أياً كانت $i = 1, 2, \dots N$) هو

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 u_2(\vec{r}_1) = \lambda_2 u_2(\vec{r}_1)$$

حيث λ_2 قيمة خاصة للمؤثر $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2$ لأن الحالة u_2 هي الحالة الوحيدة التي يمكن للإلكترون في الحالة u_1 أن يؤول إليها؛ ولدينا

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla_1^2\frac{e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{r}_1}}{\sqrt{V}} = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m}|u_2\rangle$$

وهكذا فإن الطاقة الحركية الكلية هي

$$\langle\psi| - \sum_{i=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2|\psi\rangle = \sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\langle\psi|\psi\rangle = \sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

ننتقل من الجمع إلى التكامل $\sum_k \to V\int \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}$.

نفترض أن غاز الإلكترون هو في حالة القاع (والسبينات متوازية وكلها نحو الأعلى مثلاً) وهو ما يمكن أن نفعله في درجات الحرارة المعتدلة كما رأينا؛ وهكذا فإن الطاقة الكلية هي

$$E = \frac{V}{(2\pi)^3}\int_0^{k_0}\frac{\hbar^2 k^2}{2m}4\pi k^2 dk = \frac{V4\pi}{(2\pi)^3}\frac{\hbar^2 k_0^5}{5\cdot 2m} \quad (4.5)$$

حيث k_0 قيمة متجهة الموجة على سطح كرة فيرمي $k_0 = \frac{p_0}{\hbar}$. وهي الطاقة التي وجدناها في (3.5).

إن عدد الإلكترونات الكلي N هو

$$N = V\int_0^{k_0} \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3} = \frac{4}{3}\pi k_0^3 \frac{V}{(2\pi)^3} \qquad (4.6)$$

الذي لا يختلف طبعاً عن (3.1) إلا بوضع $g = 1$ لأن السبينات متوازية وفي اتجاه واحد فرضاً. نكتب كثافة الطاقة الإلكترونية بدليل الكثافة الإلكترونية $\rho_0 = \frac{N}{V}$، لدينا من العلاقتين السابقتين

$$\varepsilon = \frac{E}{V} = \frac{3}{5}\rho_0 \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \qquad (4.7)$$

وبتبديل k_0^2 بـ $3^{2/3} \frac{(2\pi)^2}{(4\pi)^{2/3}} \rho_0^{2/3}$

$$\varepsilon = \frac{3\hbar^2}{10m}\left(6\pi^2\right)^{2/3} \rho_0^{5/3} \qquad (4.8)$$

وهو ذات التعبير الذي وجدناه في '(3.5) مقسوماً على V.

يفضل أحياناً حساب الحجم الذي يحتله الإلكترون

$$\frac{4\pi}{3} r_0^3 = \frac{1}{\rho_0}$$

وحساب نصف قطره بوحدات نصف قطر بور $a_0 = \frac{\hbar^2}{Zme^2}$ [7] أي بإعطاء المقدار غير ذي أبعاد

$$u_s = \frac{r_0}{a_0}$$

الذي تتراوح قيمته بين 2 و 6 من أجل أغلب المعادن. تحسب الطاقة بوحدات ريدبيرغ: الريدبيرغ يساوي $\frac{me^4}{2\hbar^2}$ وهكذا فإن الطاقة بهذه الوحدات من أجل الإلكترون الواحد في (4.7) هي $\frac{2,22}{r_s^2}$.

2.4– الأمواج الصوتية في الغاز الإلكتروني

نستطيع حساب سرعة الصوت في الغاز الإلكتروني انطلاقاً من العلاقة التي تربط بين سرعة انتشار أمواج الصوت الميكانيكية وضغط الغاز وكثافة كتلته. $v^2 = \frac{\partial P}{\partial \rho}$، حيث $\rho = m\rho_0$. أما P فقد حسبناها في (3.6) معتمدين على معادلة الغاز الإلكتروني المتدني. لدينا إذاً

$$v = \sqrt{\frac{1}{m} \cdot \frac{5}{3} \cdot \frac{1}{5}\left(6\pi^2\right)^{2/3} \cdot \rho_0^{2/3} \frac{\hbar^2}{m}}$$

ومن العلاقة '(3.1) التي تعطي الاندفاع الأعظمي

$$v = \frac{p_0}{\sqrt{3}m} \qquad (4.9)$$

---

[7] أخذنا $4\pi\varepsilon_0 = 1$ وثابتة البنية الدقيقة $\alpha = e$.

لنلاحظ أن سرعة الصوت v أصغر دوماً من سرعة زمرة الموجات الإلكترونية التي نرمز لها بـ V_g :

$$V_g = \left.\frac{\partial\omega}{\partial k}\right|_{k=k_0} = \left.\frac{\hbar\partial\omega}{\hbar\partial k}\right|_{k=k_0} = \left.\frac{\partial \frac{1}{2}\hbar^2 k^2}{\hbar\partial k}\right|_{k=k_0} = \frac{p_0}{m}$$

لنلاحظ كذلك أن العلاقة (4.9) علاقة عامة تنطبق على كل الغازات التي تتحرك جسيماتها بسرعة ثابتة v. ذلك أننا حسبنا في (((II.(5.(2.36 القيمة الوسطية لمقدار منحفظ واستخلصنا منها معادلة أولر في ميكانيك السوائل التي تحدد تغير كثافة الاندفاع الزمني بدليل التانسور P_{ij} ؛ نكتبها في حالة التوازن، عندما تنعدم المركبات P_{ij} $i \neq j$ ولا يبقى إلا مسقط الضغط P_i على الشكل

$$\rho\frac{d\langle V_i\rangle}{dt} = -\frac{\partial P_i}{\partial x_i}$$

أو

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\vec{\nabla}P \qquad (1)$$

نحسب بنفس الشكل كثافة الطاقة، التي لم نحسبها في ((II.5.(§2.5)، بأن نكتب من أجل $n\varepsilon = \rho\frac{V^2}{2}$،

حيث $n = \frac{N}{V}$، معادلة الانحفاظ هي :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\rho V^2}{2}\right) = -\vec{\nabla}\cdot\left(\rho\frac{V^2}{2}\vec{V}\right)$$ [8]

نستعين بمعادلة انحفاظ الكتلة ((II.(5.(2.36)'₁ والمعادلة (1) أعلاه لنجد أن تدفق الطاقة يحقق عندما تكون السرعة $V_g = V$ ثابتة

$$\dot{\varepsilon} = -V_g^2\vec{\nabla}\cdot\vec{p} \qquad (2)$$

وبالاشتقاق مرة ثانية آخذين (1) بعين الاعتبار

$$\ddot{\varepsilon} = +V_g^2\nabla^2 P \qquad (3)$$

وبما أن $P = \frac{\varepsilon}{3}$ عندما تكون السرعة ثابتة، فإن معادلة انتشار الموجة المادية هي

$$\ddot{\varepsilon} - \frac{V_g^2}{3}\nabla^2\varepsilon = 0 \qquad (4)$$

وسرعة انتشارها هي $\frac{V_g}{\sqrt{3}}$.

تجدر الملاحظة في هذا الصدد أن انتشار الأمواج الصوتية في غاز إلكتروني لا تقع فيه اصطدامات أمر مستحيل (درجة حرارة معتدلة يمكن اعتبار الغاز فيها داخل كرة فيرمي). ذلك أن الطاقة اللازمة لتغيير كثافة المادة تتبدد بسرعة كبيرة في هذه الحالة. تنتج تغيرات طاقة الإلكترون، تغير اندفاعه $\bar{k}$

---

[8] لا نفرق في حالة الأمواج الصوتية بين $\frac{d\vec{V}}{dt}$ و $\frac{\partial\vec{V}}{\partial t}$: $\frac{d\vec{V}}{dt} = \frac{\partial\vec{V}}{\partial t} + \vec{V}\vec{\nabla}\vec{V}$، الحد الثاني $\vec{V}\frac{\partial\vec{V}}{\partial\vec{r}}$ مهمل.

تحديداً، عندما يستثار لينتقل من نقطة على سطح كرة فيرمي إلى نقطة مجاورة – تغير $\vec{k}$ مماس للكرة. يقابل هذا التغير عدد كبير من مستويات الطاقة لكن طاقاتها أخفض من طاقة الموجة الصوتية وهو ما يؤدي إلى تبددها السريع.

3.4– حساب التباعد بين الإلكترونات

لنذكر بالصيغة التي استعملناها في (IV.7§2.4) لحساب فعل مؤثر التفاعل زوجاً زوجاً على متجهة حالة الـ n إلكتروناً $\langle\psi|$، مشيرين إلى كون عناصر المصفوفة حقيقية، لذا نكتب

$$\langle\psi|\sum_{i,j} U\langle\vec{r}_i,\vec{r}_j|\psi\rangle = \sum_{i,j}\int\left(\bar{u}_i(\vec{r}_i)\bar{u}_j(\vec{r}_j) - \bar{u}_i(\vec{r}_j)\bar{u}_j(\vec{r}_i)\right)U(\vec{r}_i,\vec{r}_j)u_i(\vec{r}_i)u_j(\vec{r}_j)d\vec{r}_i\cdot d\vec{r}_j \quad (4.10)$$

وهي علاقة تصح من أجل أي مؤثر. ليكن هذا المؤثر هو احتمال وجود الإلكترون i في النقطة $\vec{a}$ والإلكترون j في النقطة $\vec{b}$. والمؤثر إذاً هو $\delta(\vec{r}_i-\vec{a})\delta(\vec{r}_j-\vec{b})$ ونكتب الاحتمال من أجل كل الأزواج i و j على الشكل

$$P(a,b) = \langle\psi|\sum_{i,j}\delta(\vec{r}_i-\vec{a})\delta(\vec{r}_j-\vec{b})|\psi\rangle \quad (4.11)$$

ونحصل من (4.10) على

$$P(a,b) = \sum_{i,j}|u_i(\vec{a})|^2|u_j(\vec{b})|^2 - \bar{u}_i(\vec{b})\bar{u}_j(\vec{a})u_i(\vec{a})u_j(\vec{b}) \quad (4.11)'$$

ننتقل من الجمع على كل الموجات المستوية $u = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ إلى التكامل $\frac{1}{(2\pi)^3}\int d\vec{k}\,V$ الذي يعطي عدد الإلكترونات N؛ ننظم الاحتمال بالتقسيم على N^2 فنجد بوضع $\vec{k}_i=\vec{k}$ و $\vec{k}_j=\vec{\ell}$

$$P(a,b) = \iint\frac{d\vec{k}d\vec{\ell}}{N^2(2\pi)^6}\left(1-e^{i\vec{k}(\vec{a}-\vec{b})+i\vec{\ell}(\vec{b}-\vec{a})}\right) \quad (4.11)''$$

نحصل بالتكامل المزدوج: $\iint\frac{d\vec{k}d\vec{\ell}}{N^2(2\pi)^6}=\frac{1}{V^2}$ نظراً لـ (4.6).

أما التكامل الثاني فهو جداء التكامل $\int\frac{d\vec{k}}{N(2\pi)^3}e^{i\vec{k}(\vec{a}-\vec{b})}$ بمرافقه العقدي نكتب الاحتمال على الشكل

$$P(\vec{a},\vec{b}) = \frac{1}{V^2} - \left|\int\frac{d\vec{k}}{N(2\pi)^3}e^{i\vec{k}(\vec{a}-\vec{b})}\right|^2 \quad (4.12)$$

نحسب احتمال وجود إلكترونين ما على بعد $\vec{R}$ أحدهما عن الآخر بأن نضع

$$P(\vec{R}) = \int\delta(\vec{a}-\vec{b}-\vec{R})P(\vec{a},\vec{b})d\vec{a}\,d\vec{b}$$

يعطي التكامل على $\bar{b}$ الحجم V والتكامل على $\bar{a}$ بأخذ المقدار $\bar{b}=0$ في التكامل $\int\delta(\bar{a}-\bar{b}-\bar{R})4\pi a^2 da$ القيمة $4\pi R^2$. بأخذ التكامل على $d\bar{k}$ في (4.12) الشكل

$$\left(\frac{1}{(2\pi)^3 N}\right)^2 \left|\int e^{ikR\cos\theta} 2\pi \sin\theta d\theta k^2 dk\right|^2$$

نكامل في البدء على θ فنحصل على $\frac{2k^2 \sin kR}{kR}$، ثم نكامل على k بالتجزئة ونحصل على

$$\frac{1}{R^3}\left[\sin k_0 R - k_0 R \cos k_0 R\right]$$

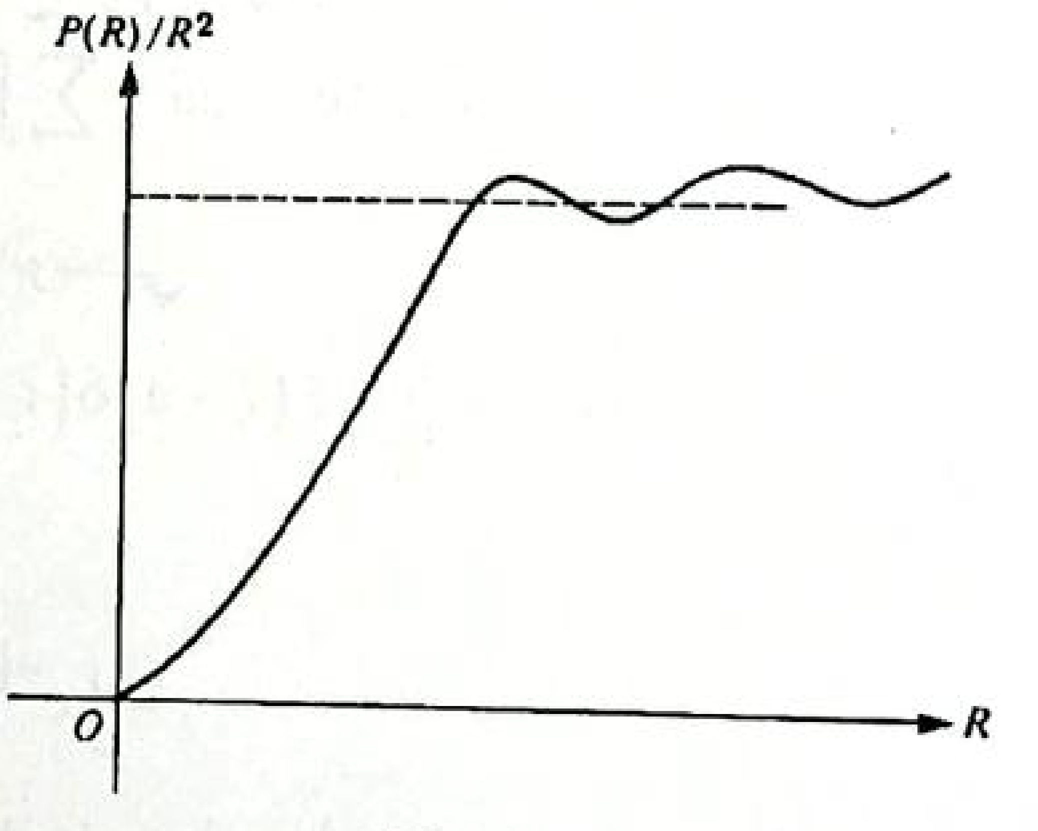
وعلى $P(R)$

$$P(\bar{R}) = \frac{4\pi R^2}{V} - 4\pi R^2 V\left(\frac{4\pi}{(2\pi)^3 N}\right)^2 \left[\frac{1}{R^3}\left(\sin k_0 R - k_0 R \cos k_0 R\right)\right]^2$$

نكتب N^2 بدليل (4.6) ونحصل على القيمة التالية للاحتمال

$$P(\bar{R}) = \frac{4\pi R^2}{V}\left\{1 - \left[\frac{3}{k_0^3 R^3}\left(\sin k_0 R - k_0 R \cos k_0 R\right)\right]^2\right\} \qquad (4.13)$$

هذه النتيجة هامة لأنها ترينا أن $P(R)=0$ من أجل $R=0$، الشكل.11، وبالتالي يمكن النظر إلى الإلكترونات التي لها ذات السبين ككرات صلبة لا تخترق بعضها وأن التفاعل الكهربائي الراكد على المدى القريب غير ذي مفعول، الشكل.11.



الشكل. 11

من الواضح أنه من الممكن كتابة (4.10) بأخذ '(4.11) بعين الاعتبار على الشكل

$$\langle\psi|\sum_{i,j} U(\bar{r}_i, \bar{r}_j)|\psi\rangle = \int U(\bar{a}, \bar{b}) P(\bar{a}, \bar{b}) d\bar{a}\, d\bar{b} \qquad (4.14)$$

إن المقدار المكامل هو جداء الطاقة الكامنة بين إلكترونين مضروباً باحتمال وجودهما في المكانين المقابلين لهذه الطاقة والجمع على كل الأوضاع الممكنة. لنرمز بـ $\rho(a)$ لكثافة الإلكترونات في الوضع $\bar{a}$؛ إنها تعريفاً

$$\rho(\vec{a}) = \sum_i \delta(\vec{r}_i - \vec{a}) \qquad (4.15)$$

ولنحسب عدد الإلكترونات n الموجودة في حيز ما من الحجم V وليكن D؛ نكتب n على الشكل

$$n = \sum_i D(\vec{r}_i) = \sum_i \int \delta(\vec{r}_i - \vec{a}) D(\vec{a}) d\vec{a} \qquad (4.16)$$

$$= \int \rho(a) D(\vec{a}) d\vec{a}$$

تأخذ الدالة $D(\vec{a})$ قيمتين فقط

$$D(\vec{a}) = \begin{cases} 1 & \vec{a} \in D \\ 0 & \vec{a} \notin D \end{cases}$$

نحسب القيمة الوسطية لـ n^2 عندما نريد معرفة الترجحات. إنها

$$\langle n^2 \rangle = \langle \psi | n^2 | \psi \rangle = \langle \psi | \sum_{i,j} \int \delta(\vec{r}_i - \vec{a}) D(a) \delta(\vec{r}_j - \vec{b}) D(\vec{b}) d\vec{a} d\vec{b} | \psi \rangle \qquad (4.17)$$

ونظراً لـ (4.11)

$$= \int D(\vec{a}) D(\vec{b}) P(\vec{a}, \vec{b}) d\vec{a}\, d\vec{b}$$

4.4– طاقة الترابط

يمكننا كذلك حساب كثافة الاندفاع $\rho_{\vec{k}}$؛ إنها بدليل (4.15)

$$\rho_{\vec{k}} = \int \rho(a) e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}} d\vec{a} = \sum_i \int \delta(\vec{r}_i - \vec{a}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}} d\vec{a}$$

ونحسب قيمة انحرافها التربيعي الوسطي

$$\langle \psi | |\rho_{\vec{k}}|^2 | \psi \rangle = \sum_{i,j} \int \delta(\vec{r}_i - \vec{a}) \delta(\vec{r}_j - \vec{b}) e^{i\vec{k}(\vec{a}-\vec{b})} d\vec{a}\, d\vec{b}$$

ويأخذ (4.11) بعين الاعتبار

$$= \int e^{i\vec{k}(\vec{a}-\vec{b})} P(\vec{a}, \vec{b}) d\vec{a}\, d\vec{b}$$

نكامل كما فعلنا أعلاه على $\vec{b}$ فنحصل على الحجم V ويبقى عندما نجعل $\vec{b} = 0$ محول فوريي[9] $P(\vec{R}, 0)$، نرمز له بـ $S(\vec{k})$ ونكتب

---

[9] لنلاحظ أنه من الممكن دوماً تعريف محول فوريي لدالة معرفة في مجال محدد من الفضاء، وليكن الفضاء التقليدي R^3. لتكن الدالة $P(\vec{r})$ المعرفة في المجال $\vec{r} \in [0, \vec{R}]$. نكتب هذه الدالة على الشكل

$$P(\vec{r}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(\vec{r} - \vec{r}') P(\vec{r}') d\vec{r}'$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}')} P(\vec{r}') d\vec{r}'\, d\vec{k}$$

حيث استعملنا محول فوريي للدالة δ

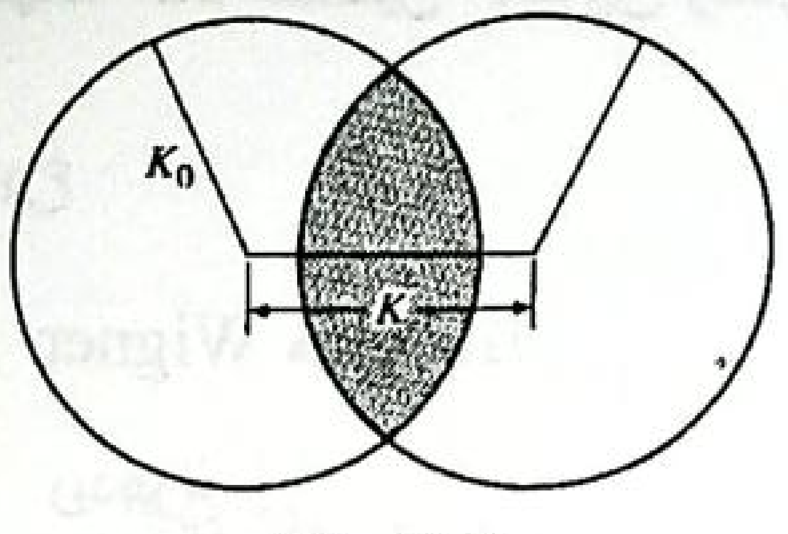
$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}'} P(\vec{r}') d\vec{r}'\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} d\vec{k} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} P(\vec{k})\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} d\vec{k}$$

$$\langle P_{\vec{k}}^2 \rangle = \langle \psi | |\rho_{\vec{k}}|^2 | \psi \rangle = V \int e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} P(\vec{R}, 0) d\vec{R} = V\, S(\vec{k}) \quad (4.18)$$

نحسب $S(\vec{k})$ من "(4.11) ويبرهن أنه حجم القطاع الكروي المشترك بين كرتي فيرمي ويساوي لـ

$$S(\vec{k}) = -\frac{3(2\pi)^3}{4\pi k_0^3}\left[1 - \frac{3}{4}\frac{k}{k_0} + \frac{1}{16}\left(\frac{k}{k_0}\right)^3\right] \quad (4.19)$$

من أجل $k \leq 2k_0$ و $k \neq 0$ كما يساوي الصفر من أجل $k > 2k_0$ $S(\vec{k}) = 0$، الشكل.12،



الشكل.12

لنحسب الآن طاقة تفاعل الإلكترونات زوجاً زوجاً. إنها باستعمال (4.14) ووضع $|\vec{r}_i - \vec{r}_j| = r_{ij}$

$$\langle \psi | \sum_{i,j} \frac{e^2}{r_{ij}} | \psi \rangle = \int \frac{e^2}{R} P(\vec{R}) d\vec{R}$$

نكتب $P(\vec{R})$ بدليل محول فوريي $S(\vec{k})$

$$P(\vec{R}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} S(\vec{k}) d\vec{k}$$

ونكامل على $d\vec{R} = 2\pi \sin\theta R^2 dR d\theta$ فنحصل كما في الحساب الذي أجريناه أعلاه على

$$\langle \psi | \sum_{i,j} \frac{e^2}{r_{ij}} | \psi \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{4\pi e^2}{k^2} S(\vec{k}) d\vec{k} \quad (4.20)$$

لنستبدل في هذا التكامل $S(\vec{k})$ بالمقدار الذي تعطيه العلاقة (4.19) فيعطي الحساب النتيجة التالية

$$\langle \psi | \sum_{i,j} \frac{e^2}{r_{ij}} | \psi \rangle = -\frac{0,916}{r_s} \quad \text{ريدبيرغ} \quad (4.21)$$

لا ننسى أن $r_s = \frac{r_0}{a_0}$ وهي ليست ذات أبعاد. تكتب الطاقة الكلية للإلكترون الواحد في نظمة الإلكترونات الحرة هذه على الشكل

$$E = \frac{2,22}{r_s^2} - \frac{0,916}{r_s} + \varepsilon_c \quad (4.22)$$

حيث وضعنا محول فوريي لـ $P(\vec{r})$:

$$P(\vec{k}) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} P(\vec{r}) d\vec{r}$$

$P(\vec{k})$ معرف من أجل قيم $P(\vec{r})$ بين الصفر و $\vec{R}$.

الحد الأول هو طاقة الإلكترون الحركية والثاني طاقته الكامنة نتيجة تنابذه مع كل الإلكترونات الأخرى والحد الثالث المسمى طاقة الترابط هو الفرق بين طاقة الإلكترون الفعلية وطاقتيه الحركية والكامنة. تبلغ الطاقة الكامنة حدها الأدنى وهو $-\frac{1,7}{r_s}$ ريدبيرغ في حال توزع الإلكترونات توزعاً منتظماً في بنية بلورية مكعبة ومركزية. ومن جهة أخرى فإنه من الممكن عندما تكون كثافة الإلكترونات ضعيفة، $r_0 = \frac{1}{\rho_0}$ كبير ومعه $r_s = \frac{r_0}{a_0}$ فإن الطاقة الحركية مهملة أمام الطاقتين الأخريين وتقدر الطاقة ε_c عندئذ بـ

$$\varepsilon_c = -\frac{0,88}{r_s} \quad \text{ريدبيرغ}$$

أما من أجل r_s صغيرة فقد قدر فيغنر Wigner هذه الطاقة بـ

$$\varepsilon_c = -\frac{0,88}{r_s + 7,8} \quad \text{ريدبيرغ}$$

الفصل الثالث

المادة المكثفة

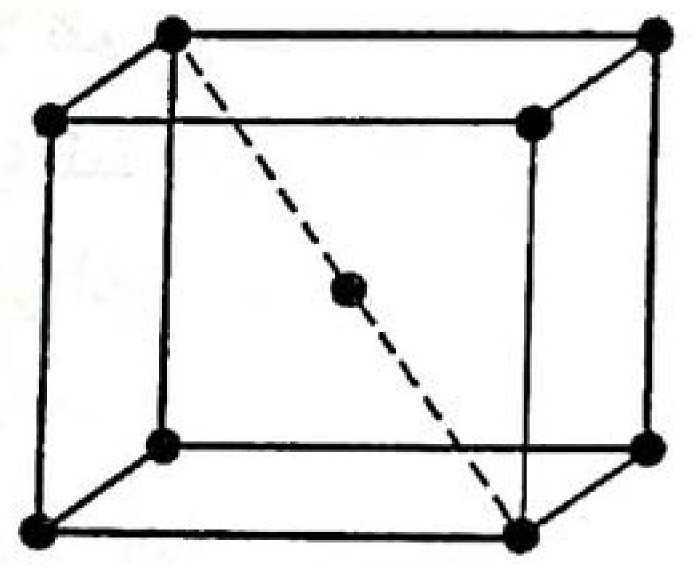
1- الجسم الصلب 97
2- الإلكترون في حقل دوري، الموصلات والعوازل 109
3- المغنطيسية الحديدية 127
4- فائقية التوصيل 138
5- فائقية السيولة Superfluidity 154

الفصل الثالث: المـادة المكثفـة

1. الجسم الصلب

1.1– التناظر البلوري

أشرنا في الفصل الأول إلى مظهري الجسم الصلب فقد يبدو عديم الشكل أو على شكل بلوري. نقصد بشكل بلوري أن للجسم الصلب تناظرات في الفضاء؛ فهو يتألف من شبيكات Lattices (عناصر أولية) ذات أشكال هندسية منتظمة، مكعبات على سبيل المثال، وبصورة أعم متوازيات سطوح قواعدها رباعية أو سداسية مثلاً تحتل الذرات أوضاعاً محددة فيها : رؤوس الشكل، مركزه، الشكل.1،



الشكل.1

مركز بعض سطوحه، الخ. وتتكرر الشبيكات في مختلف اتجاهات الفضاء لتولد الشبكة البلورية. نعبر عن انتظام شكل هندسي ما، عن تناظره بزمرة تحدد بقاءه على حاله، عدم تغيره نتيجة دورانات معينة – $\frac{2\pi}{6}$ مثلاً حول مركز المسدس – وتناظرات بالنسبة لمحور تناظر (الانعكاسات) أو لنقطة تناظر، الخ. يطلق على زمر تناظر الأشكال الهندسية المنتظمة اسم الزمر النقطية؛ وهي زمر منتهية، انتقالاتها منفصلة على نقيض زمرة الدورانات أو زمرة لورانتس اللامنتهية ذات الانتقالات المتصلة حيث يشكل أي دوران لامنته في الصغر عنصراً من عناصر الزمرة. نعبر عن تكرار الشبيكة في الاتجاهات المختلفة للفضاء الإقليدي بانسحابات منتهية أيضاً ونسمي زمرة فضائية لدالة ما $f(\vec{r})$، ونرمز لها بـ G_s Spatial، زمرة التحولات على $\vec{r}$ التي يبقى معها $f(\vec{r})$ منحفظاً – لا تتغير قيمته.

ونرمز لعنصر ما من G_s بـ $g \in G_s$. لدينا

$$\vec{r}' = g\vec{r} = M\vec{r} + \vec{a}$$

وللانحفاظ بـ $f(\vec{r}) = f(\vec{r}')$.

حيث M مصفوفة قلوبة (حتى يكون لعنصر الزمرة مقلوب) $M \in GL(n, R^3)$ و $\vec{a} \in R^3$ متجهة منتهية، تشكل مجموعة الانسحابات زمرة جزئية، نرمز لها بـ T، من الزمرة الفضائية G_S،

$$\vec{r}' = \vec{r} + \vec{a}$$

وهي زمرة جزئية مميزة[1] بمعنى أن الخارج (حاصل القسمة) G_S/T زمرة تنطبق على الزمرة النقطية.

إن عدد صفوف الزمر النقطية هو 32 صفاً وعدد الزمر الفضائية الكلي هو 230 زمرة، تمت دراستها في أواخر القرن التاسع عشر. وهي تهم بالدرجة الأولى فيزيائي وكيميائي البلورات؛ كما تهم العاملين في موضوع عبور الطور من النوع الثاني الشائك والمتميز بانكسار التناظر كما أشرنا إلى ذلك في (II.4§1.6,7). ونحن لن نعالج كمثال عليه في هذا الفصل إلا المغنطيسية الحديدية التي تكسر التناظر من التناظر الكروي الممثل بزمرة الدورانات المتصلة $SO(3)$ إلى التناظر الدائري $SO(2) \subset SO(3)$.

لن ننظر إذاً إلا إلى الانسحابات التي تشكل الشبكة البلورية انطلاقاً من الشبيكة(الخلية) البدائية. لننظر إلى الشبيكة التي نكونها :بدأ من نقطة معينة، نسميها عقدة هي موضع ذرة من نوع معين من الذرات، بأخذ ثلاث متجهات $\vec{a}_1$، $\vec{a}_2$، $\vec{a}_3$ لا تقع في مستو واحد، نسميها أدوار القاعدة، تعين أوضاع الذرات الأولى الثلاث من ذات النوع المجاورة للعقدة وتتعين الشبيكة بمتوازي سطوح مبني على هذه المتجهات الثلاث. وهكذا فإننا ننتقل من شبيكة إلى أخرى، من عقدة إلى أخرى بأدوار من الشكل

$$\vec{a} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \qquad (1.1)$$

حيث n_1، n_2، n_3 أعداد صحيحة $\in \mathbb{Z}$ (موجبة أو سالبة) وتنقلنا من شبيكة إلى أخرى لها ذات الشكل وذات الحجم وتحتوي على ذات العدد من الذرات ذات النوع المعين، ذات التوزع المتطابق في الشبيكتين.

إن أي ذرة من هذه الذرات تصلح لتكون عقدة للشبيكة والعقد متكافئة من وجهة النظر هذه وتشكل انسحابات كل منها بأدوار من الشكل (1.1) مجموعة من النقاط الموزعة بشكل دوري منتظم في الفضاء تسمى شبكة برافيه Bravais. نحصل بدأً من عقدة أخرى – من موضع ذرة من نوع معين آخر– على شبكة برافيه منزاحة عن الشبكة الأولى وهكذا تتكون الشبكة البلورية من عدة شبكات برافيه مندمجة بعضها في البعض الآخر تقابل كل واحدة منها نوع ووضع الذرة (العقدة) في الشبيكة البدائية.

لابد من الملاحظة هنا أن اختيار الشبيكة البدائية ليس وحيد المقابلة لأن اختيار أدوار القاعدة اختيار حر، إذ يمكن اختيار ثلاث متجهات $\vec{a}'_i$ $i = 1, 2, 3$ بمؤثر B، مصفوفة 3×3 عناصرها أعداد صحيحة

$$\vec{a}'_i = \sum_j B_i^j \vec{a}_j$$

---

[1] ليست كل مجموعة صفوف G/G' حيث G' زمرة جزئية من G زمرة بالضرورة. يجب أن تكون G' زمرة مميزة (يقال ايضاً عادية أو لا متغيرة) تحقق العلاقة $\alpha G' \alpha^{-1} = G'$ أياً كان العنصر $\alpha \in G$.

تخضع لشرط واحد هو أن يكون معينها ذا قيمة مطلقة تساوي 1 : ذلك أن من الضروري أن تكون B قلوبة وأن تكون عناصر مقلوبها أعداداً صحيحة

$$\bar{a}_i = \sum_j \left(B^{-1}\right)_i^j \bar{a}'_j$$

وبما أن معين B^{-1} هو مقلوب معين B وكليهما عدد صحيح فإن

$$\left|B_i^j\right| = \pm 1 \qquad (1.2)$$

وهكذا فإن اختيار أدوار قاعدة جديدة خاضعة للشرط (1.2) يحدث شبيكات مختلفة الشكل لكن حجمها يبقى دون تغيير؛ نتحقق من ذلك بفضل شبكات برافيه. تحتوي الشبيكة أياً كانت أدوار قاعدتها على عقدة تنتمي إلى إحدى شبكات برافيه التي يمكن إنشاؤها من أجل شبكة بلورية معينة، أي أن عدد الشبيكات في حجم ما مساو لعدد العقد – لعدد الذرات ذات النوع والوضع المعين – وأنه مستقل عن نوع الشبيكة وبالتالي فإن حجم الشبيكة (حاصل قسمة حجم الشبكة البلورية على عدد الشبيكات) ثابت.

2.1- الشبكة المعكوسة Reciprocal

إن لكل المقادير الفيزيائية المعبرة عن خصائص الشبكة البلورية نفس دورية الشبكة؛ هذا هو حال الحقل الكهرطيسي داخل الشبكة الذي تولده ذرات الشبكة، أو كثافة الشحنة التي تنتجها إلكترونات هذه الذرات، أو احتمال وجود الذرات في هذا الجوار أو ذاك من الشبكة. ليكن U أحد هذه المقادير، لدينا

$$U\left(\bar{r} + n_1\bar{a}_1 + n_2\bar{a}_2 + n_3\bar{a}_3\right) = U\left(\bar{r}\right) \qquad (1.3)$$

من أجل كل أدوار القاعدة $\bar{a}_1$، $\bar{a}_2$، $\bar{a}_3$ وكل الأعداد الصحيحة n_1، n_2، n_3. لننشر الدالة الدورية $U(\bar{r})$، ككل الدالات الدورية على شكل سلسلة فوريي

$$U\left(\bar{r}\right) = \sum_{\bar{b}} e^{2\pi i \bar{b}\cdot\bar{r}} \qquad (1.4)$$

يجب أن تحقق المتجهات $\bar{b}$ شرط الدورية (1.3)

$$\sum_{\bar{b}} e^{2\pi i \bar{b}\cdot\bar{r}} = \sum_{\bar{b}} e^{2\pi i \bar{b}\cdot\left(\bar{r} + n_1\bar{a}_1 + n_2\bar{a}_2 + n_3\bar{a}_3\right)}$$

يجب إذاً أن تكون الجداءات السلمية الثلاثة

$$\bar{b}\bar{a}_1 = p_1$$
$$\bar{b}\bar{a}_2 = p_2$$
$$\bar{b}\bar{a}_3 = p_3$$

أعداداً صحيحة.

لدينا ثلاث معادلات خطية بمركبات المتجهة $\vec{b}$، معين نظمة المعادلات هو حجم متوازي السطوح المقام على متجهات القاعدة : $V = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$ ؛ ونكتب الحل بدليل صغيرات المعين المقابلة على الشكل

$$\vec{b} = \frac{1}{V}\{p_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) + p_2(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) + p_3(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)\} \quad (1.5)$$

$$\equiv p_1\vec{b}_1 + p_2\vec{b}_2 + p_3\vec{b}_3 \quad (1.5)'$$

تبين (1.5) أن أبعاد $\vec{b}_i$ هي أبعاد مقلوب طول $[L]^{-1}$ وتساوي مقلوب أضلاع متوازي السطوح المبني على $\vec{a}_1$، $\vec{a}_2$، $\vec{a}_3$؛ كما تبين أن

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = \delta_{ij} \quad (1.6)$$

أي أن $\vec{b}_i$ عمودي على المتجهتين $\vec{a}_k$ و $\vec{a}_j$ $i \neq j \neq k$.

يمكن إنشاء شبكة شبيكاتها الأولية هي متوازيات السطوح المبنية على المتجهات $\vec{b}_1$، $\vec{b}_2$، $\vec{b}_3$ تسمى الشبكة المعكوسة. إن حجم الشبيكة في الشبكة المعكوسة

$$V' = \vec{b}_1(\vec{b}_2 \times \vec{b}_3) = \frac{1}{V^3}(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \cdot [(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \times (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)]$$

إن الجداء الثلاثي بين المعقوفتين $\vec{A} \times (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)$ يقتصر على $\vec{a}_1[(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \cdot \vec{a}_2]$ أي على $V\vec{a}_1$

ومنه

$$V' = \frac{1}{V} \quad (1.7)$$

إنه مقلوب حجم شبيكة الشبكة المباشرة.

3.1– قانون تشتت الموجات Dispersion

يتعين وضع الشبيكة في الشبكة البلورية بتعيين وضع أحد رؤوسها – بتعيين إحدى عقدها –، أي بالمتجهة $\vec{r}_s$ (الشعاع المتجه) التي منشؤها الرأس المقابل له في شبيكة نعتبرها منشأ الشبيكات؛ تحقق $\vec{r}_s$ العلاقة

$$\vec{r}_s = s_1\vec{a}_1 + s_2\vec{a}_2 + s_3\vec{a}_3$$

حيث $\vec{a}_i$ أدوار القاعدة و $s_i \in \mathbb{Z}$ تمثل عدد الانسحابات في اتجاه المحاور الثلاثة $\vec{a}_i$ – أضلاع الشبيكة. نرقم ذرات الشبيكة حسب ترتيب محدد ونرمز بـ u_n^s لمتجهة حالة الذرة n في الشبيكة s. تحدث اهتزازات الذرة n في الشبيكة s بتأثير الذرات المجاورة لها التي نرمز لمتجهات حالتها بـ $u_{n'}^{s'}$. سنتوقف كما فعلنا سابقاً عند الحد الثاني في نشر الطاقة الكامنة للذرة أي عند قوى التفاعل مع الذرات المجاورة للذرة (n, s) المتناسبة خطياً مع المسافة التي تبعدها عن (n, s). ونكتب بالتالي معادلة الهزاز التوافقي (الخطي) للذرة (n, s) حول وضع التوازن $u_n^s = 0$ على الشكل

$$\ddot{u}_n^s = -\sum_{n',s'} \lambda_{nn'}^{s'-s} u_{n'}^{s'} \quad (1.8)$$

(تشير النقطتان إلى المشتق الثاني بالنسبة للزمن) حيث الثوابت λ لا تتوقف إلا على الفرق $s'-s$ لأن قوى التفاعل بين الذرات تابعة لوضع الشبيكات بالنسبة لبعضها بعضاً. نفتش عن حل لمعادلة الهزاز (1.8) على شكل توضيع لموجات مستوية من الشكل

$$u_n^s = u_n e^{-i(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{r}_s)} \quad (1.9)$$

تتبع السعة (العقدية) u_n رقم الذرة في الشبيكة، فهي مختلفة بين ذرة وأخرى ولكنها هي ذاتها في كل الشبيكات. تصبح المعادلة (1.8) من أجل الموجة المستوية

$$\omega^2 u_n e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_s} = \sum_{n',s'} \lambda_{nn'}^{s'-s} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_{s'}} u_{n'} \quad (1.8)'$$

نضع $s-s'=\sigma$ و $\vec{r}_\sigma = \vec{r}_{s'} - \vec{r}_s$ فتأخذ المعادلة الشكل

$$\sum_{n'\sigma} \lambda_{nn'}^{\sigma} e^{i\vec{k}\vec{r}_\sigma} u_{n'} - \omega^2 u_n = 0 \quad (1.8)''$$

ونحصل على نظمة معادلات خطية متجانسة بالسعات المجهولة يقتضي وجود حل غير تافه لها أن يكون معينها مساوياً للصفر

$$\left| \sum_{\sigma} \lambda_{nn'}^{\sigma} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_\sigma} - \omega^2 \delta_{n'n} \right| = 0 \quad (1.10)$$

يمكن للذرة أن تهتز خطياً في ثلاثة اتجاهات ورتبة المعين هي إذاً $3r$، حيث r عدد ذرات الشبيكة ولدينا بالتالي كثير حدود من الدرجة $3r$ بالمتغير ω^2.

صادفنا هذه الحالة في الفصل الأول (§4.1) وعينا التواترات الخاصة (المقامات modes) للاهتزاز؛ إلا أن الأمر مختلف هنا لأن الحلول التي نحصل عليها تابعة لمتجهة الموجة $\vec{k}$ $\omega = \omega(\vec{k})$. تسمى هذه الدالة عندئذ قانون تشتت الموجات، أو بعبارة أخرى إن التواتر ω دالة متعددة المقابلة multivalent ذات $3r$ فرعاً.

لنذكر أن متجهة الموجة $\vec{k}$، وبشكل أكثر تحديداً الاندفاع $\vec{p} = \hbar\vec{k}$، تنتمي إلى ثنوي الفضاء الإقليدي R^3- كما تنتمي المتجهة رباعية الأبعاد $(E, \vec{p})$ إلى ثنوي فضاء مينكوفسكي في النسبية الخاصة. هذا من جهة، ومن جهة أخرى فإن أبعاد $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$ هي مقلوب طول وتنتمي بالتالي في الحالة المنفصلة إلى الشبكة المعكوسة. ولما كان شرط الدورية في نشر فوريي (1.4) هو انتماء $\vec{b}$ المعرفة بـ (1.5) إلى الشبكة المعكوسة فإن $\vec{k}$ معرف في (1.9) مقاس $2\pi\vec{b}$. أي أن إضافة $2\pi\vec{b}$ إلى $\vec{k}$ لا يغير دوريته، فهو إذاً معرف في خلية بدائية من الشبكة المعكوسة. وهكذا فإن $\vec{k}$ المعرف في مجال منته من الشبكة المعكوسة ذات المحاور $\vec{b}_1$، $\vec{b}_2$، $\vec{b}_3$ غير المتعامدة بصورة عامة

$$-\pi b_i \le k_i \le +\pi b_i \qquad i = 1, 2, 3 \quad (1.11)$$

كاف لتعيين الفرع $\omega(\vec{k})$ تماماً؛ ويمثل $\omega(\vec{k})$ قطاعاً band أو منطقة حجمها منته $2\pi\vec{b}$ تسمى منطقة بريللوان الأولى.

يمثل الفرع $\omega(k_1, k_2, k_3)$ فوق مستوى في الفضاء $(\omega, \vec{k})$ ويمكن لهذه الفروع أن تتقاطع فيما بينها (كما يمكن لحزمة المنحنيات $\omega(k)$ أن تتقاطع من أجل بعض قيم k)، قد يقع التقاطع من أجل قيم لا ترتبط بوضع $\vec{k}$ في الشبكة المعكوسة، ونقول إنها قيم عشوائية؛ وقد يقع من أجل قيم مرتبطة بتناظر وضعها في الشبكة المعكوسة أي بتناظر البلورة تحددها نظرية الزمر الخارجة عن إطار هذه الدراسة الأقرب إلى الوصفية.

نميز من بين الفروع التي عددها $3r$ ثلاثة فروع $\omega_1(\vec{k})$، $\omega_2(\vec{k})$، $\omega_3(\vec{k})$ هي دالات متجانسة خطية بمركبات $\vec{k}$ تتعدم من أجل $\vec{k}=0$ (من أجل أطوال الموجة الكبيرة جداً)، أما من أجل أطوال الأمواج الكبيرة (بالنسبة للمسافة بين الذرات) فيمكن النظر إلى البلورة كجسم متصل مرن يهتز ككل تنتشر فيه هذه الفروع الثلاثة وتقابل الأمواج الصوتية التي تعرضنا لها في الفصل الأول والتي تجعل الجسم الصلب ينزاح ككل من أجل $\lambda \to \infty$: تهتز كل الذرات بذات الطور.

لا تنعدم الفروع $3(r-1)$ الأخرى من أجل $\vec{k}=0$ ولكنها تسعى إلى حد ثابت عندما تتناهى $\vec{k}$ إلى الصفر وتسمى الاهتزازات في هذه الحالة اهتزازات ضوئية. وقد تتطابق هذه الحدود الثابتة لبعض الفروع حسب خصائص تناظر البلورة. تصبح النقطة $\vec{k}=0$ في هذه الحالة نقطة تشعب Ramification، نقطة شاذة يستحيل نشر الدالة $\omega(\vec{k})$ في جوارها على شكل سلسلة. أما في الحالات الأخرى التي لا يتطابق الحد الثابت لأحد هذه الفروع الضوئية مع حدود الفروع الأخرى فمن الممكن نشر $\omega(\vec{k})$ في جوار $\vec{k}=0$ على شكل سلسلة بقوى المركبات k_i على أن نلاحظ أن معادلة الحركة (1.8) ككل معادلات الحركة تبقى منحفظة عندما نعكس إشارة الزمن أو عندما ننتقل من موجة صادرة $\omega t - \vec{k}\vec{r}$ إلى موجة واردة $\omega t + \vec{k}\vec{r}$؛ ينتج عن ذلك أن ω دالة زوجية بالمتغير $\vec{k}$: $\omega(\vec{k}) = \omega(-\vec{k})$ ولا يظهر في النشر إلا القوى الزوجية لمركبات k. نكتب إذاً التواترات الضوئية في جوار النقطة $\vec{k}=0$ عندما لا تكون هذه النقطة نقطة تشعب على الشكل

$$\omega = \omega_0 + \sum_{i,j} \alpha_{ij} k_i k_j \qquad (1.12)$$

حيث توقفنا عن النشر من الدرجة الثانية، ω_0 هو التواتر الحدي و α_{ij} ثوابت.

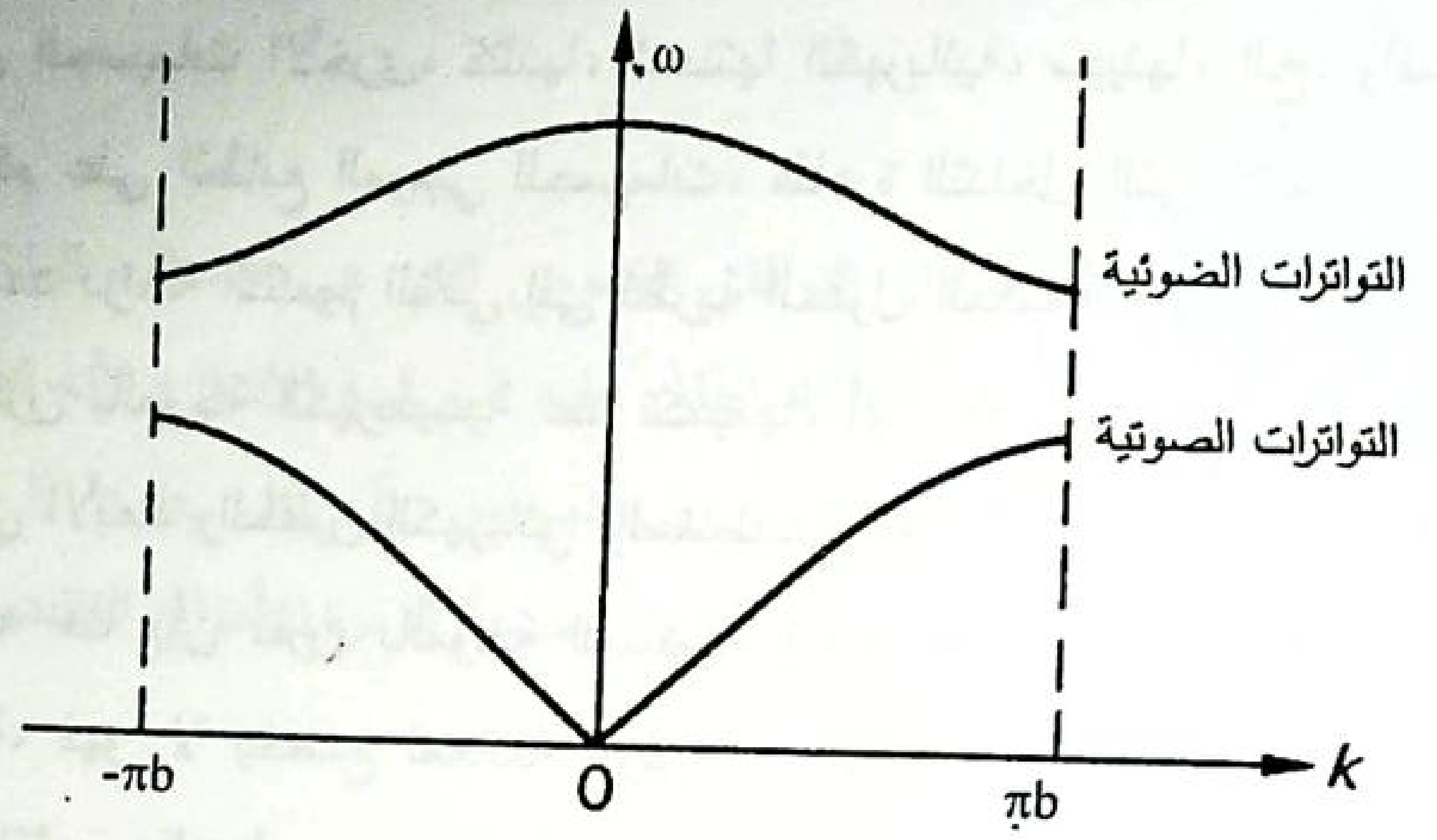
تتميز الفروع الضوئية، على نقيض الفروع الصوتية الثلاثة، بتواترات عالية، بأطوال أمواج من رتبة المسافة بين الذرات. تختلف أطوار اهتزاز الذرات المتجاورة عن بعضها وتصبح متعاكسة عندما تقع متجهة الموجة $\vec{k}$ على حدود منطقة بريللوان : $\vec{k} = \frac{\pi}{\vec{a}_i} = \pi\vec{b}_i$ حسب (1.6). يتحرك الأيونان الموجب والسالب في البلورات الأيونية ($NaCl$ على سبيل المثال) بطورين متعاكسين وتتفاعل مقامات الاهتزازات

العرضانية تفاعلاً قوياً مع حقل الموجة الضوئية الواردة فيمتصها، ولذا سميت فروع التواترات العالية بالفروع الضوئية.

نكتب التواترات الصوتية على الشكل

$$\omega = \alpha(\vec{e})k \qquad (1.13)$$

حيث $\alpha(\vec{e})$ دالة تابعة لاتجاه المتجهة $\vec{k}$ و ω هي إحدى الدالات الخطية المتجانسة الثلاث التي تنعدم من أجل $\vec{k} = 0$، يمثل الشكل.2 طيف التواترات ببعد واحد،



الشكل.2

تأخذ التواترات الضوئية في جوار النقطة الشاذة – عندما تتطابق هذه التواترات – الشكل

$$\omega = \omega_0 + f(k_i) \qquad (1.14)$$

حيث $f(k_i)$ دالة متجانسة بالمركبات k_i من الدرجة الأولى أو الثانية.

<u>ملاحظة</u> :

لا يصح كل ما سبق إلا في حالة الهزاز التوافقي، حالة توقف نشر الطاقة الكامنة عند الدرجة الثانية، حالة القوى الخطية. لا تتفاعل الأمواج المستوية (وحيدة اللون) فيما بينها وتنتشر بحرية في الشبكة البلورية. أما عندما يكون الهزاز لا توافقي أي عندما نأخذ الحدود التالية في نشر الطاقة الكامنة فيقع تفاعل بين الأمواج وتبعثر بعضها البعض الآخر. كما لا يصح إلا عندما تكون دورية الشبكة مثالية : لا عيوب في الشبكة ولا شوائب ولا نظائر مختلفة للذرات.

4.1- أشباه الجسيمات Quasiparticles والتفاعلات الجماعية

تحدثنا منذ الفصل الأول من المجلد الأول في هذا الكتاب عن الجسيمات الأولية التي تتشكل منها كل المادة وبينا شيئاً فشيئاً أنها مؤلفة من فيرميونات – الليبتونات والكواركات – ومن بوزونات هي في الواقع وسطاء التفاعلات الاساسية الأربعة : الجاذبية الكونية ووسيطها الغرافيتون والكهرطيسية ووسيطها الفوتون والضعيفة ووسطائها $W^{\pm}$ ، Z والقوية ووسطائها الكلوونات الثمانية. لكل من هذه الجسيمات خصائص محددة تميزها عن الجسيمات الأخرى، كتلتها، شحنتها الكهربائية، سبينها، الخ. وأقمنا في المجلد الرابع دراسة ميكانيك الكم على الطابع الموجي للجسيمات، ظاهرة التداخل التي لازمت بين الجسيم والموجة؛ كما أشرنا، في صدد دراسة التكميم الثاني إلى نظرية الحقول المكممة التي تقرن بالموجة جسيماً- على غرار الفوتون المقترن بالموجة الكهرطيسية عند تكميمها، أي عند النظر إلى المقادير الفيزيائية الداخلة فيها، الكمون رباعي الأبعاد والحقلين الكهربائي والمغنطيسي كمؤثرات.

سنفعل الشيء ذاته هنا بأن نقرن بالموجة المستوية (1.9) المعبرة عن اهتزازات الذرة جسيماً ليس كالجسيمات العادية، فهو لا يخضع لمعادلة حركة منحفظة بتحولات لورانتس كالفوتون أو الإلكترون النسبوي مثلاً، ولا ينتشر حقله الموجي في كل أنحاء الفضاء وإنما ينحصر ضمن حدود النظمة الكمومية التي ندرسها (الشبكة البلورية الآن) والتي ينتشر فيها الاهتزاز ولا يتجاوزها، ولا تحقق مقاديره الديناميكية – اندفاعه كما سنرى – قوانين الانحفاظ الناتجة عن خواص المكان والزمان. ولذا يطلق على هذه الجسيمات الافتراضية المقترنة بانتشار الاهتزازات (والإثارات بصورة عامة) اسم أشباه الجسيمات. أول هذه الجسيمات الشبيهة الفونون Phonon حامل الموجة المستوية (1.9). وقد اختير هذا الاسم على وزن الفوتون – جسيم الضوء – كجسيم للصوت لأن بعض هذه الأمواج هي الأمواج الصوتية كما رأينا. هناك أيضاً كحامل لموجة الاستقطاب البولارون Polaron وهو شبه جسيم مشحون ومتنقل محاطاً بأيونات المادة وهناك الماغنون Magnon وهي الإثارات المتسقة لسبينات الإلكترونات في المادة والمولدة للمغنطيسية، الخ.

لا تتفاعل الفونونات فيما بينها في حالة الهزاز التوافقي – وتكون من وجهة النظر هذه غازاً كاملاً – ولكنها تتفاعل : تتصادم فيما بينها، تحدث وتفنى كما هو حال الجسيمات العادية في حالة الهزاز اللاتوافقي.

سنقبل كموضوعة من الآن فصاعداً أنه يمكن النظر إلى مستويات طاقة نظمة كمومية مثارة إثارة ضعيفة كمجموعة طاقات عدد من الجسيمات الشبيهة – وتسمى أيضاً الإثارات الأولية –، اندفاعها $\vec{p}=\hbar\vec{k}$ ، حيث $\vec{k}$ متجهة الموجة المقترنة بالجسيم الشبيه، وطاقتها $\varepsilon=\hbar\omega$ ، حيث ω تواتر الموجة؛ تتحرك في

4.1- أشباه الجسيمات Quasiparticles والتفاعلات الجماعية

تحدثنا منذ الفصل الأول من المجلد الأول في هذا الكتاب عن الجسيمات الأولية التي تتشكل منها كل المادة وبينا شيئاً فشيئاً أنها مؤلفة من فيرميونات – الليبتونات والكواركات – ومن بوزونات هي في الواقع وسطاء التفاعلات الاساسية الأربعة : الجاذبية الكونية ووسيطها الغرافيتون والكهرطيسية ووسيطها الفوتون والضعيفة ووسطائها $W^{\pm}$ ، Z والقوية ووسطائها الكلوونات الثمانية. لكل من هذه الجسيمات خصائص محددة تميزها عن الجسيمات الأخرى، كتلتها، شحنتها الكهربائية، سبينها، الخ. وأقمنا في المجلد الرابع دراسة ميكانيك الكم على الطابع الموجي للجسيمات، ظاهرة التداخل التي لازمت بين الجسيم والموجة؛ كما أشرنا، في صدد دراسة التكميم الثاني إلى نظرية الحقول المكممة التي تقرن بالموجة جسيماً- على غرار الفوتون المقترن بالموجة الكهرطيسية عند تكميمها، أي عند النظر إلى المقادير الفيزيائية الداخلة فيها، الكمون رباعي الأبعاد والحقلين الكهربائي والمغنطيسي كمؤثرات.

سنفعل الشيء ذاته هنا بأن نقرن بالموجة المستوية (1.9) المعبرة عن اهتزازات الذرة جسيماً ليس كالجسيمات العادية، فهو لا يخضع لمعادلة حركة منحفظة بتحولات لورانتس كالفوتون أو الإلكترون النسبوي مثلاً، ولا ينتشر حقله الموجي في كل أنحاء الفضاء وإنما ينحصر ضمن حدود النظمة الكمومية التي ندرسها (الشبكة البلورية الآن) والتي ينتشر فيها الاهتزاز ولا يتجاوزها، ولا تحقق مقاديره الديناميكية – اندفاعه كما سنرى – قوانين الانحفاظ الناتجة عن خواص المكان والزمان. ولذا يطلق على هذه الجسيمات الافتراضية المقترنة بانتشار الاهتزازات (والإثارات بصورة عامة) اسم أشباه الجسيمات. أول هذه الجسيمات الشبيهة الفونون Phonon حامل الموجة المستوية (1.9). وقد اختير هذا الاسم على وزن الفوتون – جسيم الضوء – كجسيم للصوت لأن بعض هذه الأمواج هي الأمواج الصوتية كما رأينا. هناك أيضاً كحامل لموجة الاستقطاب البولارون Polaron وهو شبه جسيم مشحون ومتنقل محاطاً بأيونات المادة وهناك الماغنون Magnon وهي الإثارات المتسقة لسبينات الإلكترونات في المادة والمولدة للمغنطيسية، الخ.

لا تتفاعل الفونونات فيما بينها في حالة الهزاز التوافقي – وتكون من وجهة النظر هذه غازاً كاملاً – ولكنها تتفاعل : تتصادم فيما بينها، تحدث وتفنى كما هو حال الجسيمات العادية في حالة الهزاز اللاتوافقي.

سنقبل كموضوعة من الآن فصاعداً أنه يمكن النظر إلى مستويات طاقة نظمة كمومية مثارة إثارة ضعيفة كمجموعة طاقات عدد من الجسيمات الشبيهة – وتسمى أيضاً الإثارات الأولية –، اندفاعها $\vec{p} = \hbar\vec{k}$، حيث $\vec{k}$ متجهة الموجة المقترنة بالجسيم الشبيه، وطاقتها $\varepsilon = \hbar\omega$، حيث ω تواتر الموجة؛ تتحرك في

كل الحجم الذي تحتله النظمة وتعبر عن التفاعلات الجماعية لجسيمات النظمة مع أنها لا تنسب إلى أي جسيم منها فردياً.

ولما كانت أطياف الطاقة من النوع البوزوني أو الفيرميوني فإن الجسيمات الشبيهة هي إما بوزونات سبينها عدد صحيح وإما فيرميونات سبينها عدد نصف صحيح؛ وبما أن الانتقال بين حالات السبين لا يقع إلا بوحدات كاملة فإنه لا يمكن إفناء أو إحداث أشباه الجسيمات الفيرميونية إلا زوجاً زوجاً.

5.1- الفونونات

تتفق الموضوعة التي قبلناها مع طاقة الهزاز التوافقي الكمومي التي هي أضعاف الطاقة $\hbar\omega$، كما هو حال كمّ الضوء، الفوتون. أما الاندفاع $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ فسنطلق عليه اسم شبه الاندفاع لأنه ليس وحيد المقابلة. رأينا أن $\vec{k}$ معرف مقاس $2\pi\vec{b}$ في الشبكة المعكوسة ذات المحاور $\vec{b}_1$، $\vec{b}_2$، $\vec{b}_3$ – $\vec{b}$ معرف في $(1.5)'$ وبالتالي فإن $\vec{p}$ معرف مقاس $2\pi\hbar\vec{b}$. نحدد سرعة الفونون بسرعة الزمرة للأمواج التقليدية

$$\vec{v} = \frac{\partial\omega}{\partial\vec{k}} = \frac{\partial\hbar\omega}{\partial\hbar\vec{k}} = \frac{\partial\varepsilon}{\partial\vec{p}} \qquad (1.15)$$

حيث ε هي طاقة الفونون، والعلاقة مماثلة للعلاقة المألوفة بين الطاقة والاندفاع والسرعة.

ينطبق كل ما قلناه في §1.3 عن العلاقة بين التواتر ω ومتجهة الموجة $\vec{k}$ على العلاقة بين طاقة الفونون وشبه الاندفاع: للدالة $\varepsilon(\vec{p})$ $3r$ فرعاً منها ثلاثة أنواع من الفونونات تأخذ الطاقة فيها، من أجل القيم الصغيرة لشبه الاندفاع شكل دالة خطية متجانسة بمركبات $\vec{p}$ وتأخذ سرع الفونونات عندئذ قيماً لا تتوقف على اتجاه $\vec{p}$ وإنما على طويلته فقط وهي قيم سرعة الصوت في الشبكة البلورية.

تتفاعل الفونونات فيما بينها، عندما ننتقل من تقريب الهزاز التوافقي إلى اللاتوافقي، على شكل تصادمات مرنة أو غير مرنة وتشكل هذه التصادمات آلية إحداث التوازن الترموديناميكي في غاز الفونونات أي في الشبكة البلورية. تتحفظ الطاقة في تصادم الفونونات ولكن انحفاظ شبه الاندفاع لا يتم إلا مقاس $2\pi\hbar\vec{b}$؛ وهكذا فإن كان اندفاعا الفونونين المتصادمين $\vec{p}_1$ و $\vec{p}_2$ قبل الاصطدام وأصبحا $\vec{p}_1'$ و $\vec{p}_2'$ بعد الاصطدام فإن

$$\vec{p}_1 + \vec{p}_2 = \vec{p}_2' + \vec{p}_2' + 2\pi\hbar\vec{b} \qquad (1.16)$$

تخضع الفونونات إلى إحصاء بوز–آنشتاين لأنه من الممكن إثارة أي عدد نشاء من الفونونات في البلورة في آن واحد، أو بتعبير آخر، من الممكن أن نجد في كل حالة كمومية عدداً غير محدد من الفونونات. ومن جهة أخرى فإن عدد الفونونات الكلي غير محدد ويصح عليه ما قلناه عن عدد الفوتونات في الإشعاع الأسود حيث استخلصنا أن الكمون الكيميائي يساوي الصفر. وهكذا فإن عدد الفونونات ذات الاندفاع $\vec{p}$ هو

$$\langle n_p \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon(p)}{T}} - 1} \tag{1.17}$$

يساوي هذا العدد في درجات الحرارة العالية $(T >> \varepsilon)$

$$\langle n \rangle = \frac{T}{\varepsilon} \tag{1.18}$$

ويتناسب مع درجة الحرارة.

يتيح لنا مفهوم الفونون توصيف حالة الجسم الصلب خارج وضع التوازن، كما فعلنا في حالة الغاز الكامل؛ تحدد توزعات الفونونات على مختلف الحالات الكمومية المتاحة حالة الجسم الصلب. رأينا $(2.39)_b$.2) أن أنتروبية الغاز البوزوني خارج وضع التوازن معطاة بالعلاقة

$$S = \sum_j G_j \mathrm{Ln} \frac{eN_j}{G_j} \tag{1.19}$$

حيث N_j عدد الفونونات في مجموعة الحالات الكمومية المتقاربة (مستويات الطاقة المتقاربة) G_j. تصح هذه العلاقة في درجات الحرارة المرتفعة $T >> \theta$ حيث θ درجة حرارة دوباي Debye. نكتب صيغة الأنتروبية هذه على شكل تكامل حيث عنصر حجم عدد حالات الفونونات في كل فرع من فروع الطيف

$$d\tau = \frac{dVd\bar{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{dVd\bar{k}}{(2\pi)^3}$$

ولتكن $U(\bar{r}, \bar{k})d\tau$ طاقة الاهتزازات الحرارية لمتجهات الموجة الواقعة في المجال $[\bar{k}, \bar{k} + d\bar{k}]$، وتقابل عدد الفونونات N_j في النشر المنفصل؛ ويقابل $\hbar\,\omega(\bar{k})$ الحالة الكمومية المتاحة G_j. لدينا إذاً بدلاً عن (1.19) الصيغة

$$S = \int \mathrm{Ln}\, e \frac{U(\bar{r}, \bar{k})}{\hbar\omega(\bar{k})} d\tau \tag{1.20}$$

يمتد التكامل على الـ 3r فرعاً للدالة $\omega(\bar{k})$.

6.1– كثافة عدد الفونونات

إنها الكثافة التي تقابل عدد الاهتزازات في عنصر حجم متجهة الموجة $\frac{d\bar{k}}{(2\pi)^3}$ وفي واحدة حجم البلورة. نرمز لدالة توزع التواتر بـ $g(\omega)$ ولعدد الاهتزازات التي يتراوح تواترها بين ω و $\omega + d\omega$ بـ $g(\omega)d\omega$، وهو عدد يميز طيف اهتزاز الشبيكة. إنه عدد يختلف بين فرع وآخر من فروع الطيف ω_α، $\alpha = 1, 2, \dots 3r$ ولكننا لن نأخذ بعين الاعتبار الدليل α لتبسيط الكتابة. إن $g(\omega)d\omega$ هو الحجم الواقع

في فضاء $\vec{k}$ بين سطحين معينين بثبات ω، ثابـــت $= \omega(\vec{k})$ تفصلهما مسافة لامتناهية في الصغر $d\vec{k}$. إن غراديان ω : $\frac{\partial\omega}{\partial\vec{k}} = \vec{\nabla}_k\omega$ عمودي على السطح ثابت التواتر ومواز لـ $d\vec{k}$ وبالتالي فإن $d\vec{k} = \frac{d\omega}{\vec{\nabla}_k\omega}$، ومن جهة أخرى فإن $dSdk = d\vec{S} \cdot d\vec{k}$ – حيث $d\vec{S}$ عنصر سطح من $\omega(\vec{k})$ – في عنصر حجم الشبكة المعكوسة هو عدد الفونونات في عنصر الحجم؛ ومن ثم فإن التكامل على حجم الشبكة المعكوسة يعطي عدد الاهتزازات في واحدة حجم البلورة

$$g(\omega)d\omega = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\vec{k} \cdot d\vec{S} = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \frac{dS}{\nabla_{\vec{k}}\omega}d\omega$$

$$g(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \frac{dS}{\left|\nabla_{\vec{k}}\omega\right|} \qquad (1.21)$$

لنلاحظ أن لـ $\omega(\vec{k})$ في كل منطقة من مناطق فضاء الشبيكات المعكوسة نهاية عظمى أو صغرى، واحدة أو أكثر ينعدم فيها الغراديان ولـ $g(\omega)$ في هذه الحالة نقطة تجوف (نقطة سرج Saddle point).
لنلاحظ كذلك أنه من الممكن نشر ω في جوار نقطة حدية (عظمى أو صغرى) معينة بـ $\vec{k}_0$ على الشكل

$$\omega(\vec{k}) - \omega(\vec{k}_0) = \frac{1}{2}\gamma_{ik}\left(k_i - k_{i_0}\right)\left(k_k - k_{k_0}\right)$$

نرمز لـ $\omega(\vec{k}_0)$ بـ ω_0. وننتقل من هذه الصيغة التربيعية إلى الشكل القانوني، إلى المحاور الرئيسية في فضاء $\vec{k}$، كما فعلنا مرات عديدة لنحصل على

$$\omega - \omega_0 = \frac{1}{2}\left[\gamma_1\left(k_1 - k_{1_0}\right)^2 + \gamma_2\left(k_2 - k_{2_0}\right)^2 + \gamma_3\left(k_3 - k_{3_0}\right)^2\right] \qquad (1.22)$$

حيث γ_1، γ_2، γ_3 هي القيم الرئيسية (القطرية) للتانسور المتناظر γ_{ik}. نرمز بـ x_i للمقدار $\sqrt{\gamma_i}\left(k_i - k_{i_0}\right)$ $i = 1, 2, 3$ ونكتب

$$\omega - \omega_0 = \pm\frac{1}{2}\left(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2\right) \qquad (1.23)$$

التي تعطينا معادلة كرة في فضاء x عندما تكون التواترات ثابتة. نكتب $g(\omega)$ في هذا الفضاء على الشكل

$$g(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^3\sqrt{\gamma}}\int \frac{dS_x}{\left|\vec{\nabla}_x\omega\right|}$$

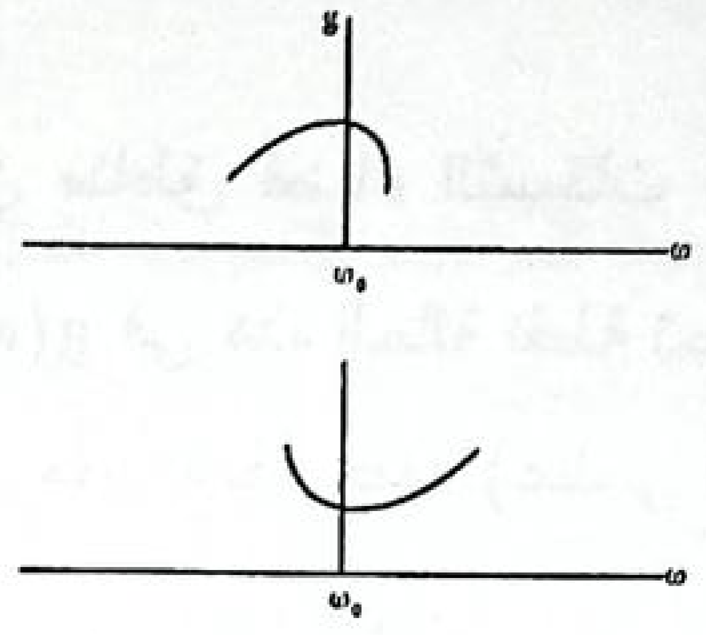
حيث $\gamma = \left|\gamma_1\gamma_2\gamma_3\right|$.
وضعنا الدليل x على عنصر السطح لنميزه عن dS في (1.21) المعرف في الفضاء $\vec{k}$. يساوي عنصر السطح $x^2d\Omega$ حيث $d\Omega$ عنصر الزاوية المجسمة. ومن جهة أخرى فإن $\vec{\nabla}_x\omega = \pm x$ ومنه بالتكامل

$$g(\omega) = \frac{4\pi}{(2\pi)^3\sqrt{\gamma}}x = \frac{1}{\pi^2\sqrt{2\gamma}}\sqrt{\left|\omega - \omega_0\right|} \qquad (1.24)$$

إن لمشتق $g(\omega)$ نقطة شاذة من أجل $\omega = \omega_0$ إذ يتناهى إلى اللانهاية. إلا أنه لابد من التذكير إلى إمكانية تقاطع عدة سطوح تساوي التواتر، $\omega(\vec{k}) = c$، تنتمي إلى فروع مختلفة عندما تأخذ ω قيماً قريبة من ω_0 – على ألا تقع ω_0 قرب أو على حافة إحدى مناطق التواتر (مناطق بريللوان التي رسمنا مخطط المنطقة الأولى منها)؛ وهكذا فإن (1.24) هي القسم الشاذ من كثافة عدد الفونونات وقد يكون من الأفضل كتابة هذه الكثافة كما يلي :

$$g(\omega) = g(\omega_0) + \frac{\sqrt{\omega - \omega_0}}{\pi^2 \sqrt{2\gamma}} \qquad (1.25)$$

من أجل $\omega \gtrless \omega_0$ (حسبما يكون ω_0 نهاية عظمى $\omega < \omega_0$ أو نهاية صغرى) و $g(\omega) = g(\omega_0)$ من أجل الجهة الثانية، الشكل.3.

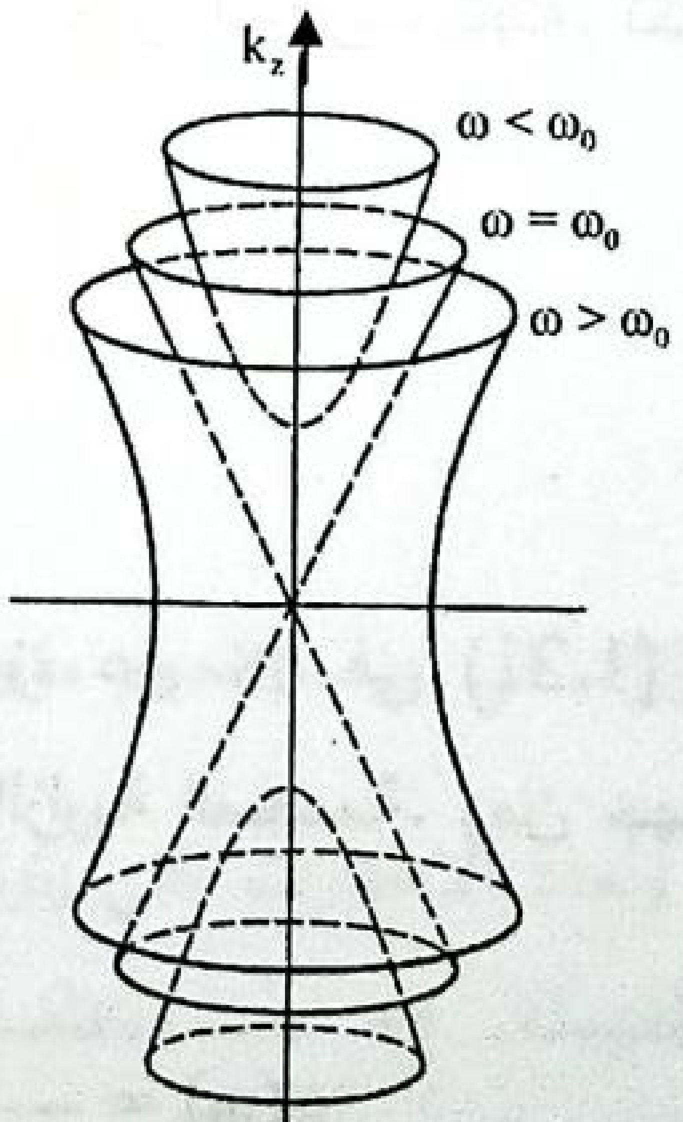


الشكل.3

لنعد الآن إلى (1.22) لنرى ما يجري في جوار نطقة تجوف. تتدنى معادلة مجسم القطع الناقص إذ تصبح إشارة أحد الأمثال γ_i مخالفة لإشارة المثلين الآخرين، سالبة على سبيل المثال وإشارة المثلين الآخرين موجبة. نكتب (1.23) عندئذ على الشكل

$$\omega - \omega_0 = \pm\frac{1}{2}\left(x_1^2 + x_2^2 - x_3^2\right)$$

وننظر إلى الإشارة الموجبة. إن المعادلة هي معادلة مجسم قطع زائد ببساطين من أجل $\omega < \omega_0$ وببساط واحد من أجل $\omega > \omega_0$ لتصبح معادلة مخروطين من أجل $\omega = \omega_0$، الشكل.4.



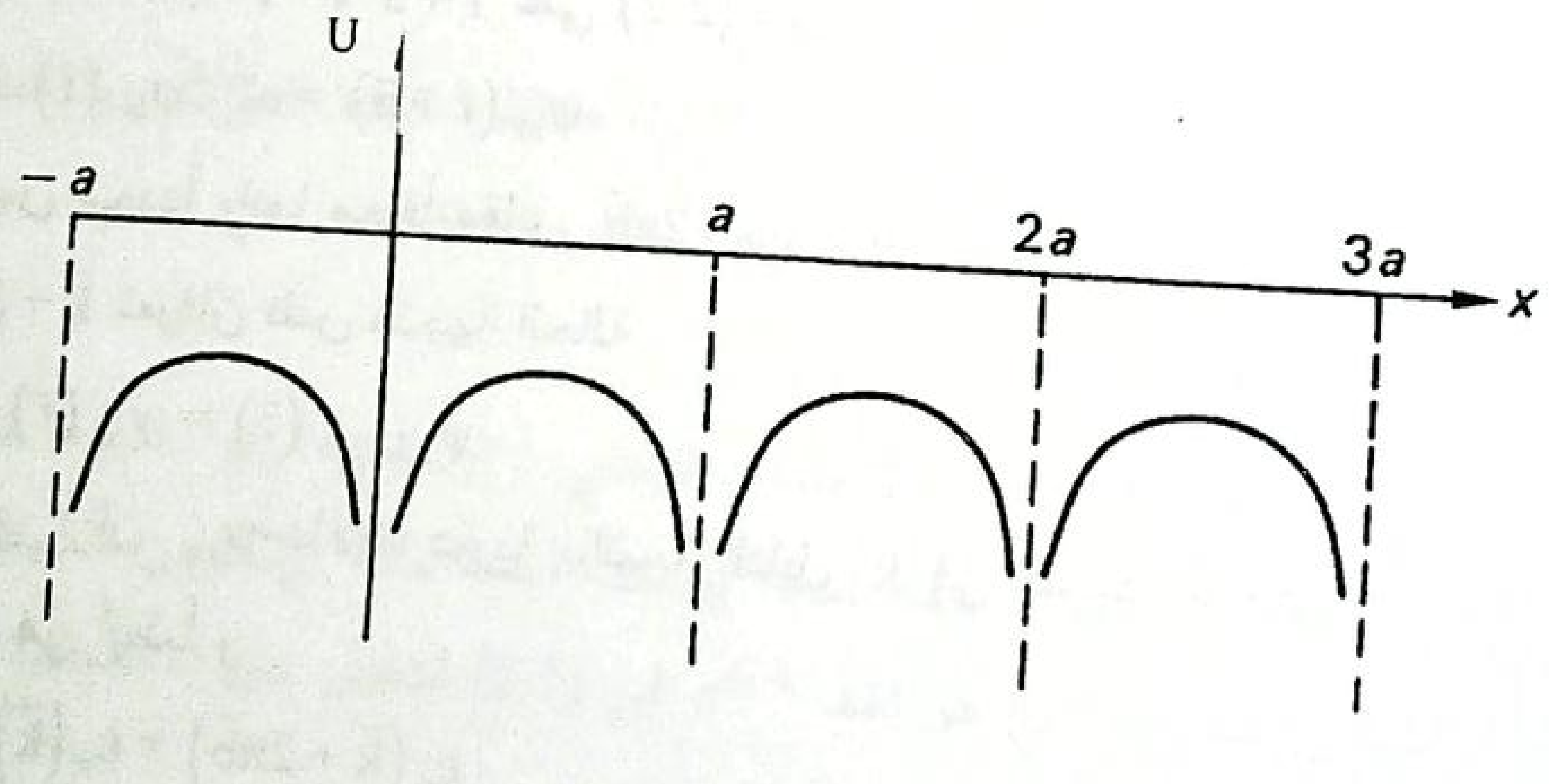
الشكل.4

1.2- دالة بلوخ Bloch

لا يمكن، عندما توجد ذرات قريبة من بعضها بعضاً، النظر إلى مستويات طاقة كل ذرة على حدة لأن غيمات الذرات الإلكترونية تتفاعل تفاعلاً قوياً فيما بينها يُلزمنا بالنظر إلى مستويات طاقة الغيمات الإلكترونية لمجموع ذرات عينة الجسم الصلب الذي ندرسه. لقد أشرنا في الفقرة 4 من الفصل السابق إلى خضوع إلكترونات الذرة الخارجية – إلكترونات التكافؤ – إلى تأثير الذرات المجاورة عليها بحيث يمكن النظر إليها في تقريب أولي كإلكترونات حرة. ونريد الآن إدخال أبسط تعبير لقوة كهربائية يخضع لها الإلكترون ناتجة عن احتلال الأيونات الموجبة مواقع معينة في البنية البلورية. لنعين موضع الإلكترون بـ $\vec{r}$، وليكن $U(\vec{r})$ الكمون الكهربائي الذي يخضع له، تعني دورية هذا الكمون أن

$$U(\vec{r}+\vec{a}) = U(\vec{r}) \qquad (2.1)$$

حيث $\vec{a} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$، $\vec{a}_1$، $\vec{a}_2$، $\vec{a}_3$ متجهات الخلية البدائية و n_3، n_2، n_1 أعداد صحيحة. نمثل هذا الكمون الدوري بالمخطط التالي، لشبكة ذات بعد واحد (الدور a)، الشكل.5،



الشكل.5

يجب أن تكون متجهة حالة الإلكترون دورية هي أيضاً، أي أنها لا تتغير بالانسحاب من $\vec{r}$ إلى $\vec{r}+\vec{a}$. وهكذا فإن كانت $\psi(\vec{r})$ حلاً مستقراً لمعادلة شرودينغر فإن $\psi(\vec{r}+\vec{a})$ حل مستقر أيضاً يوصف نفس الحالة، ولا يختلف هذان الحلان عن بعضهما إلا بمعامل ثابت C

$$\psi(\vec{r}+\vec{a}) = C\psi(\vec{r})$$

$$\psi(\vec{r}+N\vec{a}) = C^N\psi(\vec{r})$$

يجب أن تكون طويلة هذا الثابت $|C|$ مساوية للواحد وإلا لتناهت متجهة الحالة إلى اللانهاية، لا تختلف بالتالي حالتا الموجة عن بعضهما إلا بطور هو $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$. نكتب متجهة حالة الإلكترون على الشكل

$$\psi_{nk}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u_{nk}(\vec{r}) \quad (2.2)$$

و

$$u_{nk}(\vec{r}+\vec{a}) = u_{nk}(\vec{r}) \quad (2.3)$$

تعرف هذه الصيغة باسم دالة بلوخ Bloch (1929)، حيث $\vec{k}$ متجهة موجة ثابتة و n ترتيب الحلول الممكنة، ذلك أن لمعادلة شرودينغر، عندما نحدد $\vec{k}$، عدداً كبيراً من الحلول – غير منته بصورة عامة – يقابل مختلف القيم المنفصلة (اللامنتهية) لطاقة الإلكترون $\varepsilon(\vec{k})$. رأينا من جهة أخرى في الفقرة السابقة أن لـ $\omega = \omega(\vec{k})$، 3r فرعاً وبالتالي فإن لـ $\varepsilon(\vec{k})$، 3r قيمة، نرمز لها بـ $\varepsilon_n(\vec{k})$ حيث n هو ترتيب المناطق الطاقية. وهي مناطق تفصل بينها فجوات طاقة – مجالات طاقة ممنوعة على الإلكترون سنحددها بعد قليل. يطلق على مناطق الطاقة اسم قطاعات الطاقة Bands. يجب أن تكون متجهات الحالة ψ_{nk} متعامدة، وتعامدها من أجل $n \neq n'$ ونفس متجهة الموجة يعني تعامد المتجهات u_{nk}؛ ونكتفي نظراً لدورية الدالة u_{nk} بالتنظيم على الخلية البدائية ذات الحجم v

$$\int_v \bar{u}_{n'k}u_{nk}dv = \delta_{n'n} \quad (2.4)$$

عندما نطبق الانسحاب $\vec{r} \leftarrow \vec{r}+\vec{a}$ على (2.2) نرى أن

$$\psi_{nk}(\vec{r}+\vec{a}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}}\psi_{nk}(\vec{r}) \quad (2.5)$$

أي أن $\vec{k}$ ليس محدداً وإنما معرفاً مقاس $2\pi\vec{b}$، حيث $\vec{b}$ متجهة لا على التعيين في الشبكة المعكوسة؛ إن $\vec{k}$ و $\vec{k}+2\pi\vec{b}$ تعرفان نفس متجهة الحالة

$$\psi_{n,k+2\pi b}(\vec{r}) = \psi_{nk}(\vec{r}) \quad (2.6)$$

أو بتعبير أخر : إن ψ_{nk} دالات دورية بالنسبة للدليل k في الشبيكة المعكوسة ودورها $2\pi\vec{b}$ وبالتالي فالطاقة دورية هي أيضاً و

$$\varepsilon_n(\vec{k}+2\pi\vec{b}) = \varepsilon_n(\vec{k}) \quad (2.7)$$

تماثل دالة بلوخ إلى حد ما متجهة حالة الإلكترون الحر، $\psi \sim e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ – موجة مستوية اندفاعها $\vec{p} = \hbar k$ منحفظ. يلعب $\hbar\vec{k}$ في دالة بلوخ دور شبه اندفاع جسيم شبيه، كما هو حال الفونون. إلا أنه لا معنى هنا للحديث عن اندفاع منحفظ لأن إلكترون لم يعد حراً وإنما تحت تأثير قوة خارجية. ومع ذلك يتميز الإلكترون الواقع تحت تأثير حقل دوري بوجود متجهة منحفظة : ليكن $\hbar\vec{k}$ شبه الاندفاع لمتجهة حالة مستقرة، يمكن للاندفاع الحقيقي للإلكترون أخذ قيم متعددة، وباحتمالات مختلفة، من الشكل $\hbar(\vec{k}+2\pi\vec{b})$ لأنه من الممكن نشر الدالة الدورية $u_{nk}(\vec{r})$ بسلسلة فوريي :

$$u_{nk}(\vec{r}) = \sum_{\vec{b}} a_{n,kb}e^{i2\pi\vec{b}\cdot\vec{r}}$$

وبالتالي

$$\psi_{nk}(\bar{r}) = \sum_{b} a_{n,kb} e^{i(\bar{k}+2\pi\bar{b})\bar{r}}$$

تبين مقارنة هذه العلاقة مع (2.6) أن معاملات فوريي a هي من الشكل $a_{n,k+2\pi b}$

$$\psi_{nk}(\bar{r}) = \sum_{b} a_{n,k+2\pi b} e^{i(\bar{k}+2\pi\bar{b})\bar{r}} \tag{2.8}$$

وهذا ما يبقي الخاصة (2.5) على حالها.

تعني (2.8) أن قيم متجهة الحالة المختلفة فيزيائياً عن بعضها واقعة في الشبيكة البدائية من الشبكة المعكوسة. وهكذا فإن معاملات فوريي محددة بالعلاقة

$$a_{n,k} = \frac{1}{v}\int u_{nk}(\bar{r})\,dv$$

وكذلك تقع كل قيم $\frac{k_i}{2\pi}$ $i = x, y, z$ المختلفة فزيائياً عن بعضها في الشبيكة البدائية من الشبكة المعكوسة، حجمها هو $\frac{1}{v}$ كما رأينا. هذا من جهة، ومن جهة أخرى، فإن $\frac{1}{v}\int \frac{\bar{k}}{(2\pi)^3} d\bar{k}$ يعين عدد الحالات – كما يعين عدد الجسيمات – في واحدة الحجوم، في سنتمتر مكعب واحد من الجسم الصلب مثلاً. وهكذا فإن عدد الحالات في كل قطاع طاقة يساوي لـ $\frac{1}{v}$ أي لعدد الخلايا البدائية في واحدة الحجوم.

إن الطاقة $\varepsilon_n(\bar{k})$، بالإضافة إلى كونها دورية حسب (2.7)، متناظرة نتيجة الدورانات والانعكاسات التي تبقي البلورة متناظرة، وتحقق بغض النظر عن وجود مركز تناظر العلاقة

$$\varepsilon_n(-\bar{k}) = \varepsilon_n(\bar{k}) \tag{2.9}$$

لأن هذه العلاقة ناتجة عن الانحفاظ نتيجة الانعكاس الزماني : إن كون ψ_{nk} متجهة حالة إلكترونية مستقرة يعني أن $\overline{\psi_{nk}}$ المرافق العقدي لمتجهة الحالة يوصف أيضاً حالة الإلكترون المستقرة ذات نفس الطاقة. لكن الترافق العقدي حسب (2.2) هو أخذ $e^{-i\bar{k}\cdot\bar{a}}$ في (2.5) للتعبير عن الانسحاب وهو ما يقابل الانتقال من $\bar{k}$ إلى $-\bar{k}$.

لننظر أخيراً إلى متجهة حالة إلكترونين في حقل دوري وضعهما $\bar{r}_1$، $\bar{r}_2$؛ نكتب متجهة الحالة التي توصفهما معاً على الشكل $\psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2)$. يجب أن تحقق (2.5)

$$\psi(\bar{r}_1 + \bar{a}, \bar{r}_2 + \bar{a}) = e^{i\bar{k}\bar{a}}\psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2)$$

$\bar{k}$ هو شبه اندفاع النظمة المؤلفة من الإلكترونين. عندما يبتعد الإلكترونان عن بعضهما بمقدار كاف فإن متجهة حالة النظمة تصبح جداء متجهتي حالة الإلكترونين

$$\psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = \psi(\bar{r}_1)\psi(\bar{r}_2)$$

يضرب كل واحد منهما بـ $e^{\bar{k}_i\cdot\bar{a}}$ $i = 1, 2$ نتيجة الانسحاب، أي أن

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}} = e^{i(\vec{k}_1+\vec{k}_2)\vec{a}}$$

و

$$\vec{k} = \vec{k}_1 + \vec{k}_2 + 2\pi\vec{b} \qquad (2.10)$$

تعني هذه العلاقة على وجه الخصوص أنه عندما يقترب الإلكترونان من بعضهما بشبه الاندفاعين $\vec{k}_1$ و $\vec{k}_2$ ويصطدمان فإن $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ هي متجهة حالة النظمة بعد الاصطدام وشبه اندفاعها هو $\vec{k} = \vec{k}_1' + \vec{k}_2' + 2\pi\vec{b}$ أي أن شبه الاندفاع منحفظ في الاصطدام مقاس $2\pi\vec{b}$

$$\vec{k}_1' + \vec{k}_2' = \vec{k}_1 + \vec{k}_2 + 2\pi\vec{b} \qquad (2.11)$$

2.2– حساب السرعة الوسطية

سيظهر لنا هذا الحساب التماثل بين شبه الاندفاع والاندفاع الفعلي للإلكترون. لنرمز بـ $\dot{\vec{r}} = \vec{V}$ إلى مؤثر السرعة في التمثيل $\frac{p}{\hbar} = k$ ولننشر متجهة الحالة ψ بدليل متجهات الحالة المتعامدة ψ_{nk} التي نأخذها كقاعدة في الفضاء $\vec{k}$

$$\psi = \sum_n \int c_{nk}\psi_{nk} d\vec{k} \qquad (2.12)$$

ولنطبق المؤثر $\vec{r}$ على طرفي هذه المتطابقة. لدينا

$$\vec{r}\psi = \sum_n \int c_{nk}\vec{r}\psi_{nk} d\vec{k} = \sum_n \int c_{nk} i\vec{\nabla}\psi_{nk} d\vec{k} \qquad (1)$$

حيث كتبنا في التمثيل k، $\vec{r} = i\hbar\vec{\nabla}_p = i\vec{\nabla}_k \equiv i\vec{\nabla}$

وحسب (2.2) فإن

$$\vec{\nabla}\psi_{nk} = i\vec{r}\psi_{nk} + e^{ik\vec{r}}\vec{\nabla}u_{nk} = i^2\vec{\nabla}\psi_{nk} + e^{ik\vec{r}}\vec{\nabla}u_{nk} \qquad (2)$$

والطرف الأخير في (1) هو

$$\sum_n \int c_{nk}\left(-i\vec{\nabla}\psi_{nk} + ie^{ik\vec{r}}\vec{\nabla}u_{nk}\right)d\vec{k} \qquad (3)$$

نكامل الحد الأول بالتجزئة، ينعدم الحد المكامل ويبقى $\int i\vec{\nabla}c_{nk}\psi_{nk}$. نلاحظ فيما يخص الحد الثاني أن $\vec{\nabla}u_{nk}$ هو على غرار u_{nk} نفسه دالة دروية ننشرها بأخذ متجهات الحالة u_{nk} من أجل k ثابتة كقاعدة متعامدة

$$\vec{\nabla}u_{nk} = -i\sum_{n'}\Omega_{nn'}u_{n'k}$$

وضعنا $-i$ لتعيين عناصر المصفوفة Ω

$$\vec{\nabla}u_{nk} = -i\sum_{n'}\langle u_{nk}|\Omega|u_{n'k}\rangle u_{n'k} \qquad (2.13)$$

ضربها بـ ie^{ikr} يعطي $\psi_{n'k}$ وهكذا فإن (1) هي

$$\vec{r}\psi = \sum_n \left\{ \int \left(i\vec{\nabla} c_{nk} \psi_{nk} + \sum_{n'} \langle u_{nk} | \Omega | u_{n'k} \rangle \psi_{n'k} \right) d\vec{k} \right\}$$

أو بالتبديل بين الجمعين $\sum_n$ و $\sum_{n'}$ في الحد الثاني

$$\vec{r}\psi = \sum_n \int \left\{ i\vec{\nabla} c_{nk} + \sum_{n'} \langle u_{n'k} | \Omega | u_{nk} \rangle \right\} \psi_{nk} d\vec{k} \qquad (4)$$

ترينا هذه العلاقة أن المؤثر $\vec{r} = i\vec{\nabla}$ يفعل في واقع الأمر في c_{nk} وأنه يساوي لـ

$$\vec{r} = i\vec{\nabla}_k + \Omega \qquad (2.14)$$

حيث تحدد عناصر المصفوفة $\langle u_{n'k} | \Omega | u_{nk} \rangle$ المؤثر Ω

ومنه مشتقه في تمثيل هايزنبرغ

$$\vec{V} = \dot{\vec{r}} = \frac{i}{\hbar}[H, \vec{r}] = -\frac{1}{\hbar}[H, \vec{\nabla}_k] + \dot{\Omega} \qquad (5)$$

الحد الأول هنا، في مصفوفة قطرية عناصرها معينة بـ nk, nk[2]، هو عند تطبيقه على دالة ما :

$$-\frac{1}{\hbar}\left(\varepsilon_n(\vec{k})\vec{\nabla} - \vec{\nabla}\varepsilon_n(\vec{k})\right) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon_n(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \qquad (6)_1$$

ونعبر عن عناصر $\dot{\Omega}$ بدليل عناصر Ω على نفس الشكل في تمثيل هايزنبرغ

$$\dot{\Omega} = \frac{i}{\hbar}[H, \Omega]$$

$$\langle nk | \dot{\Omega} | n'k \rangle = \frac{i}{\hbar}\left[\varepsilon_n(\vec{k}) - \varepsilon_{n'}(\vec{k})\right] \langle nk | \Omega | n'k \rangle \qquad (6)_2$$

نرى أن عناصر المصفوفة القطرية معدومة $(n = n')$ وهكذا فإن (5) و(6) تعطيان

$$\begin{cases} \langle nk | \vec{V} | nk \rangle = \vec{V} = \dfrac{1}{\hbar}\dfrac{\partial \varepsilon_n(\vec{k})}{\partial \vec{k}} & \text{من أجل العناصر القطرية} \\ \langle nk | \vec{V} | n'k \rangle = \langle nk | \dot{\Omega} | n'k \rangle & \text{ومن أجل العناصر غير القطرية} \end{cases} \qquad (2.15)$$

إن العناصر القطرية هي القيم الوسطية للسرعة في القطاعات الطاقية المعينة بالرقم n

$$\langle \vec{V}_n \rangle = \frac{\partial \varepsilon_n(\vec{k})}{\hbar\, \partial \vec{k}} \qquad (2.16)$$

وهي علاقة مماثلة كلياً للعلاقة المألوفة في الميكانيك الكمومي العادي.

يبين ما سبق الفرق الأساسي بين تصنيف حالات الإلكترون الحر والإلكترون في حقل دوري. تتعين طاقة الإلكترون في الحالة الأولى بمعرفة اندفاعه الذي يأخذ قيماً متصلة وغير محدودة بينما تتعين في الحالة الثانية بشبه الاندفاع، الذي يأخذ قيمه – المختلفة عن بعضها البعض فيزيائياً – في مجال محدد هو

---

[2] إن الهاميلتوني قطري سواء بالنسبة للمتغير $\vec{k}$ أو المتغير n، عناصره القطرية هي $\varepsilon_n(\vec{k})$ أما $\vec{\nabla}_k$ الذي لا يفعل إلا بالمتغير $\vec{k}$ فإنه قطري بالنسبة للمتغير n.

الشبيكة في الشبكة المعكوسة، وبعدد كمومي آخر منفصل n هو رقم القطاع الطاقي حيث تأخذ الطاقة قيماً في مجال منته. قد تتراكب هذه القطاعات ولكنها تحتفظ "بفرديتها" لأن كل قطاع يتميز بقانون تشتت خاص به : $\varepsilon = \varepsilon_n(\vec{k})$.

3.2- التشتت في بعد واحد

أ- لننظر أولاً إلى الحقل الدوري كاضطراب صغير وإلى متجهة حالة الإلكترون الحر كموجة مستوية

$$\psi^{(0)}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \qquad (2.17)$$

حيث $L = Na$ طول الجسم، N عدد ذراته و a المسافة الفاصلة بين ذرتين متجاورتين.

ننشر الحقل الدوري $U(x)$ على شكل سلسلة فوريي

$$H' = U = \sum_{-\infty}^{+\infty} U_n e^{2\pi i n \frac{x}{a}} \qquad (2.18)$$

إن عناصر مصفوفة المؤثر H' في القاعدة (2.17) هي

$$\langle k'|H'|k\rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{U_n}{L} \int_0^L e^{-ik'x} e^{2\pi i n \frac{x}{a}} e^{ikx} dx$$

وتساوي الصفر إلا إذا تحقق الشرط

$$k' = k + \frac{2\pi n}{a} \qquad (2.19)$$

ويساوي التكامل L عندئذ والطاقة، عندما نتوقف في نشر الاضطراب عند الحد الثاني (IV.(4.(1.16)))، هي

$$\varepsilon_k = \varepsilon_k^0 + H'_{kk} + \sum_{k' \neq k} \frac{|H'_{k'k}|^2}{\varepsilon_k^0 - \varepsilon_{k'}^0} \qquad (2.20)$$

أما طاقة الموجة المستوية ε_k^0 فهي $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$؛ $H'_{kk} = 0$ و $H'_{k'k} = U_n$، ومنه

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \sum_n \frac{|U_n|^2}{\frac{\hbar^2}{2m}\left[k^2 - \left(k - \frac{2\pi n}{a}\right)^2\right]} \qquad (2.20)'$$

ينعدم المخرج في أحد حدود المجموع n عندما تأخذ متجهة الموجة القيمة $k = \frac{\pi n}{a}$ وتصبح الطاقة لامنتهية. يجب والحال هذه اللجوء إلى طريقة التغيرات التي استعملناها في الفصل السابع من كتاب ميكانيك الكم وأخذ متجهة حالة تجربة $\langle\psi|$ من أجل قيم k المجاورة لـ $\frac{\pi n}{a}$ على الشكل

$$|\psi\rangle = e^{ikx}\left(A_0 + A_n e^{-2\pi i n\frac{x}{a}}\right) = e^{ikx}u(x) \tag{1}$$

ونحسب الطاقة

$$\varepsilon = \langle\psi|H|\psi\rangle = \langle\psi|-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + U_n|\psi\rangle$$

إن

$$\nabla^2 e^{ikx}u(x) = -k^2e^{ikx}u(x) + 2ike^{ikx}\frac{\partial u(x)}{\partial x} + e^{ikx}\nabla^2u(x) \tag{2}$$

نرى بسهولة عند أخذ القيمة الوسطية لـ ε أن

$$\langle u|u\rangle = \int \bar{u}u dx = L\left(A_0^2 + A_n^2\right) \tag{3}$$

ولذا ننظم $\langle\psi|$ بوضع $\left(A_0^2 + A_n^2\right)^{1/2}$ في المخرج (ψ^0 منظمة بوضع $L^{1/2}$ في المخرج)، نرى أيضاً أن

$$\int 2ik\bar{u}u'dx = 4\pi\frac{kn}{a}A_n^2 \tag{4}$$

و

$$\int \bar{u}u''dx = -\left(\frac{2\pi n}{a}\right)^2 A_n^2 \tag{5}$$

حيث u' و u'' هما المشتقان الأول والثاني بالنسبة لـ x.

وأخيراً تنعدم كل حدود U، $U_n e^{\frac{2\pi i n' x}{a}}$، من أجل $n' \neq n$ في الجداء $\int \bar{u}Uudx$ ولا يبقى إلا $2U_nA_0A_n$.

وهكذا فإن القيمة الوسطية لـ ε من أجل متجهة الحالة (1) بأخذ القيم أعلاه بعين الاعتبار هي

$$\varepsilon = \frac{\frac{\hbar^2k^2}{2m}A_0^2 + \frac{\hbar^2}{2m}A_n^2\left(k - \frac{2\pi n}{a}\right)^2 + 2A_0A_nU_n}{A_0^2 + A_n^2}$$

نرمز لـ $\frac{\hbar^2k^2}{2m}$ بـ ε_0 ولـ $\frac{\hbar^2}{2m}\left(k - \frac{2\pi n}{a}\right)^2$ بـ ε_n ونحدد الثابتتين A_0 و A_n بحساب الحد الأدنى للطاقة

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon_0A_0^2 + \varepsilon_nA_n^2 + 2A_0A_nU_n}{A_0^2 + A_n^2} \tag{2.21}$$

بتغيير A_0، δA_0 ثم A_n، δA_n فنحصل على المعادلتين

$$2A_0(\varepsilon - \varepsilon_0) - 2A_nU_n = 0$$

$$2A_n(\varepsilon - \varepsilon_n) - 2A_0U_n = 0$$

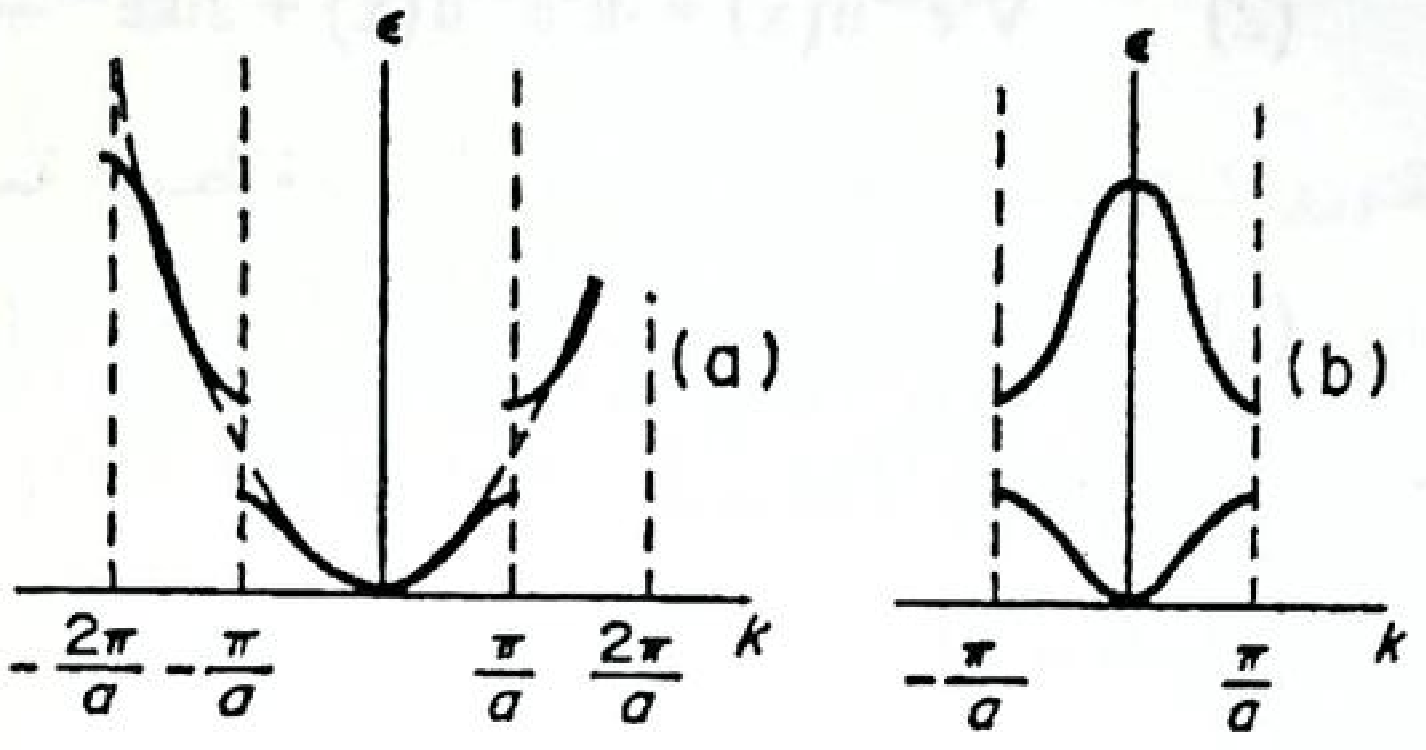
يجب أن يكون المعين مساوياً للصفر :

$$(\varepsilon - \varepsilon_0)(\varepsilon - \varepsilon_n) - U_n^2 = 0$$

ومنه قيمة الطاقة

$$\varepsilon = \frac{1}{2}\left\{\varepsilon_0 + \varepsilon_n \pm\left[(\varepsilon_0 - \varepsilon_n)^2 + 4U_n^2\right]^{1/2}\right\} \tag{2.22}$$

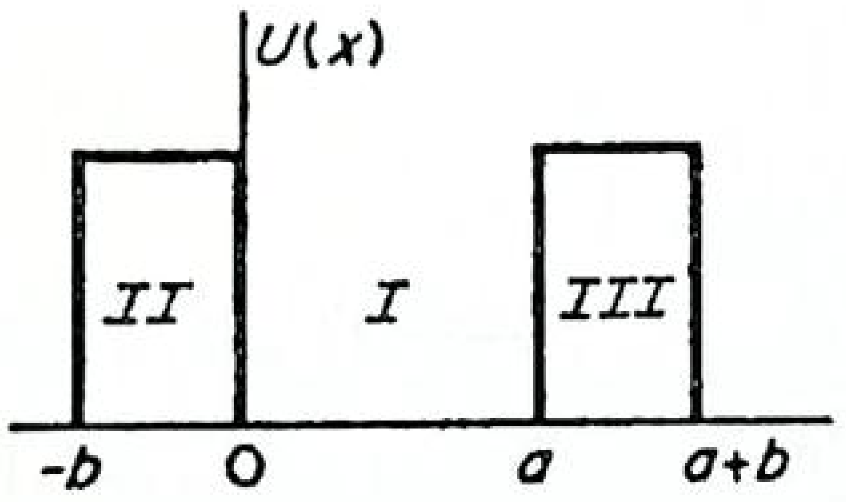
إن ما يحدد إشارة الجذر هو تطلبنا أن تصبح $\varepsilon(k)$ مساوية لـ $\varepsilon_0(k)$ عندما تكون k بعيدة عن القيمة $\frac{\pi n}{a}$ مساوية لـ $\varepsilon_0(k)$، وهكذا فإن الإشارة هي + عندما يكون $|k| > \left|\frac{\pi n}{a}\right|$ وهي − عندما يكون $|k| < \left|\frac{\pi n}{a}\right|$. أما في النقاط $k = \pm\frac{\pi n}{a}$، فيحصل انقطاع في قيمة $\varepsilon(k)$ يساوي لـ $\Delta\varepsilon(k) = 2|U_n|$ وتصبح الطاقات الواقعة في مجال الطاقة (قطاع الطاقة) $\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi n}{a}\right)^2 \pm |U_n|$ ممنوعة، الشكل.6.



الشكل.6

يظهر المخطط a) الطاقة $\varepsilon(k)$ بدليل المتغير k ذي الدور $2\pi b$ أي $\frac{2\pi}{a}$؛ الانقطاع في النقاط $\pm\frac{n\pi}{a}$ وسعة الفجوة $2|U_n|$ فيها. كما يظهر التعديل الذي يطرأ على منحني طاقة الإلكترون الحر ε_0 الممثل بخطوط القطع المكافئ المتقطعة. يبين المخطط b) قطاعي الطاقة الأولين. ويبين المخططان معاً أن قطاعات الطاقة في حقل دوري ببعد واحد لا تتراكب.

ب− نريد الآن أن نعطي للكمون الدوري في بعد واحد شكل حاجز كمون قيمته U_0 ثابتة وعرضه يساوي b، لتكن a دورة هذا الكمون، أي سعة بئر الكمون الذي يقع الإلكترون فيه، الشكل.7.



الشكل.7

نعلم (IV.2§2) أن دالة الموجة في البئر هي من الشكل

$$|\psi_1\rangle = c_1 e^{ik_1x} + c_2 e^{-ik_1x} \qquad (1)$$

وأن $k_1 = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}$

وأنها على يسار البئر، في منطقة الكمون II من الشكل

$$|\psi_{II}\rangle = c_3 e^{ik_2 x} + c_4 e^{-ik_2 x}$$

وأن
$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(\varepsilon - U_0)}{\hbar^2}} \qquad (2)$$

لن تختلف دالة الموجة في المنطقة III عن دالة $|\psi_{II}\rangle$ إلا بفرق طور يقابل فرق المسير $a+b$ فهي إذاً من الشكل

$$|\psi_{III}\rangle = e^{ik(a+b)}\left(c_3 e^{ik_2(x-a-b)} + c_4 e^{-ik_2(x-a-b)}\right) \qquad (3)$$

نحصل بمساواة الدالتين (1) و(2) في النقطة 0 ومساواة مشتقيهما على

$$c_1 + c_2 = c_3 + c_4$$

و

$$\frac{k_1}{k_2}(c_1 - c_2) = c_3 - c_4$$

وكذلك بمساواة (1) و(3) في النقطة a ومساواة مشتقيهما على

$$c_1 e^{ik_1 a} + c_2 e^{-ik_1 a} = e^{ik(a+b)}\left(c_3 e^{-ik_2 b} + c_4 e^{ik_2 b}\right)$$

$$\frac{k_1}{k_2}\left(c_1 e^{ik_1 a} - c_2 e^{-ik_1 a}\right) = e^{ik(a+b)}\left(c_3 e^{-ik_2 b} - c_4 e^{ik_2 b}\right)$$

نساوي معين هذه المعادلات الخطية بـ c_4، c_3، c_2، c_1 بالصفر؛ نكتب النتيجة من أجل $e^{ik(a+b)}$ و $e^{-ik(a+b)}$ فنحصل على العلاقة

$$\cos k(a+b) = \cos k_1 a \cos k_2 b - \frac{1}{2}\left(\frac{k_2}{k_1} + \frac{k_1}{k_2}\right)\sin k_1 a \sin k_2 b \qquad (4)$$

تحدد لنا هذه المعادلة بشكل ضمني قيمة الطاقة $\varepsilon(k)$ وتشتتها حسب قيم k. نعلم من جهة أخرى أنه عندما تكون الطاقة $\varepsilon < U_0$ فإن k_2 عدد تخيلي بحت وتتحول الدالات المثلثاتية إلى دالات زائدية وتأخذ المعادلة (4) الشكل

$$(5)\ \cos k(a+b) = \cos k_1 a\, \mathrm{ch}|k_2 b| + \frac{1}{2}\left(\frac{|k_2|}{k_1} - \frac{k_1}{|k_2|}\right)\sin k_1 a\, \mathrm{sh}|k_2 b|$$

أما في الحالة الخاصة التي يصبح فيها حاجز الكمون لامنته $U_0 \to \infty$ وعرضه متناه في الصغر $b \to 0$، بشرط أن يكون الجداء $U_0 b$ منتهياً، فإن $\mathrm{ch}|k_2 b| = 1$، $\mathrm{sh}|k_2 b| = |k_2 b|$، ومن (2) حيث رمزنا بـ $U_0 b = Pa$، $|k_2|^2 b = \frac{2mPa}{\hbar^2}$ وتأخذ (5) في هذه الحالة الشكل

$$\cos ka = \cos k_1 a + \frac{Pma^2}{\hbar^2}\frac{\sin k_1 a}{k_1 a} \qquad (6)$$

حيث ضربنا الصورة والمخرج بـ a كي تظهر $\frac{\sin k_1 a}{k_1 a}$، وطبعاً $0 = \frac{k_1}{|k_2|}k_2 b$

نكتب حاجز الكمون الدوري اللامنتهي في النقاط na على الشكل

$$U(n) = aP\sum_{n}\delta(x - an)$$

و(6) هي الحل الضمني لـ $\varepsilon(k)$ من أجل هذا الكمون.

4.2– تانسور الكتلة الإلكترونية الفعالة

لنرمز بـ $\vec{k}_0$ إلى النقطة في الفضاء الثنوي المقابلة لقيمة مطرافية للطاقة $\varepsilon_n(\vec{k})$، أصغرية في قاع منطقة بريللوان وأعظمية في نهاية هذه المنطقة. ولنفرض أنه لا يوجد تدني طاقة في هذه النقطة – لا نأخذ بعين الاعتبار السبين المؤدي إلى التدني –، يمكننا نشر $\varepsilon_n(\vec{k})$ في جوار النقطة $\vec{k}_0$، $\vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{q}$، بدءاً بحدود من الدرجة الثانية بمركبات $\vec{q}$:

$$\varepsilon_n(k) - \varepsilon_n(k_0) = \frac{1}{2}\hbar^2 m_{ik}^{-1} q_i q_k \tag{2.23}$$

يطلق على المصفوفة m التي عناصرها هي مقلوب المعاملات m_{ik}^{-1} التسع اسم تانسور الكتلة الفعالة.
نعين هذا التانسور بأن نكتب دالة بلوخ في معادلة شرودينغر على الشكل

$$\psi_{nk} = e^{i(\vec{k}_0 + \vec{q})\cdot\vec{r}} u_{nk} = e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \varphi_{nk} \tag{2.24}$$

نكتب معادلة شرودينغر

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r)\psi\right] = \varepsilon_n(k)\psi$$

بدليل الدالة φ، حيث

$$\vec{\nabla}\psi = \left(i\vec{q}\varphi + \vec{\nabla}\varphi\right)e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}$$

$$\nabla^2\psi = \left(-q^2\varphi + 2i\vec{q}\cdot\vec{\nabla}\varphi + \nabla^2\varphi\right)e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}$$

على الشكل

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r) + \left[\frac{\hbar}{m}\vec{q}\cdot\vec{p} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m}\right]\right\}\varphi_{nk} = \varepsilon_n(k)\varphi_{nk} \tag{2.25}$$

استبدلنا بـ $\vec{p}$ المؤثر $\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$. إن المتجهة $\vec{q}$ صغيرة جداً في جوار النقطة $\vec{k} = \vec{k}_0$ ولذا فإنه من الممكن النظر إلى المقدار بين المعقوفتين كهاميلتوني اضطراب H'. تنطبق φ_{nk} على ψ_{nk} من أجل $\vec{q} = 0$ وهذا ما يسمح لنا بنشر H' في نظمة القاعدة $\left|\psi_{nk_0}\right\rangle = \left|nk_0\right\rangle$. إن

$$\left\langle nk_0\right|\vec{p}\left|nk_0\right\rangle = 0 \tag{2.26}$$

لأن $\bar{k}_0$ مطرافي والحدود الخطية بـ $\bar{q}$ معدومة. يجب إذاً متابعة نشر الحد الأول من هاميلتوني الاضطراب H'، المقدار $H_1' = \bar{q} \cdot \bar{p}$، إلى الدرجة الثانية

$$H_1'^2 = \frac{\hbar^2}{m^2}(q_i\, p_i)(q_k p_k) = \frac{\hbar^2}{2m^2}\, q_i \cdot q_k\left[(p_i p_k + p_k p_i)\right]$$

بينما نكتفي بالاضطراب من الدرجة الأولى من أجل الحد الثاني من H'، المقدار $H_2' = \frac{\hbar^2}{2m}q^2$. لدينا والحال هذه، بتطبيق $[IV.4.(1.10)_{2,1}]$ من أجل كل زوج i, k، الإصلاح من الدرجة الثانية لـ H_1'

$$\varepsilon_1 = \sum_{n\neq n'} \frac{(H_1')_{nn'}(H_1')_{n'n}}{\varepsilon_n(k_0) - \varepsilon_{n'}(k_0)} = \frac{\left|(H_1')_{nn'}\right|^2}{\varepsilon_n(k_0) - \varepsilon_{n'}(k_0)}$$
$$= \frac{\hbar^2}{2m^2} q_i q_k \sum_{n\neq n'} \frac{(p_i)_{nn'}(p_k)_{n'n} + (p_k)_{nn'}(p_i)_{n'n}}{\varepsilon_n(k_0) - \varepsilon_{n'}(k_0)}$$

والإصلاح من الدرجة الأولى لـ H_2'

$$\varepsilon_2 = \frac{\hbar^2}{2m}(H_2')_{nn} = \frac{\hbar^2}{2m}q^2 = \frac{\hbar^2}{2m}q_i q_k \delta_{ik}$$

إن مجموع هذين الإصلاحين هو الفرق بين $\varepsilon_n(k)$ و $\varepsilon_n(k_0)$ ويحدد لنا بمقارنته مع معاملات $q_i q_k$ في الطرف الثاني من (2.23) عناصر التانسور m_{ik}^{-1} :

$$m_{ik}^{-1} = \frac{\delta_{ik}}{m} + \frac{1}{m^2}\sum_{n\neq n'} \frac{(p_i)_{nn'}(p_k)_{n'n} + (p_k)_{nn'}(p_i)_{n'n}}{\varepsilon_n(k_0) - \varepsilon_{n'}(k_0)} \qquad (2.27)$$

إن التانسور m_{ik}^{-1} تانسور متناظر يمكن كتابته على شكل قطري، كتابة الصيغة التربيعية على شكل قانوني، وإعطاء (2.23) الشكل التالي

$$\varepsilon_n(k) - \varepsilon_n(k_0) = \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i^*}q_i^2 \qquad i = 1, 2, 3 \qquad (2.28)$$

وضعنا إشارة النجمة على العناصر m_{ii} لتمييزها عن الكتلة الفعلية للإلكترون. إنها الكتلة الفعالة عندما ندرس حركة الإلكترون ببعد واحد. يبين مخطط بريللوان الذي ينحرف عن مخطط طاقة الإلكترون الحر – في نقطة انعطاف – أن الكتلة الفعالة تتحول من موجبة إلى سالبة في هذه النقطة. تظهر الحسابات أن نسبة الكتلة الفعالة إلى الكتلة الحقيقية $\frac{m^*}{m}$ تتراوح بين 1,4 من أجل الليتيوم و 0,83 من أجل السيزيوم.

نكتب (2.28) في حال فرق طاقة ثابت $\varepsilon_n(k) - \varepsilon_n(k_0) = \varepsilon$ على الشكل

$$\frac{q_1^2}{a_1^2} + \frac{q_2^2}{a_2^2} + \frac{q_2^3}{a_3^2} = 1 \qquad (2.29)$$

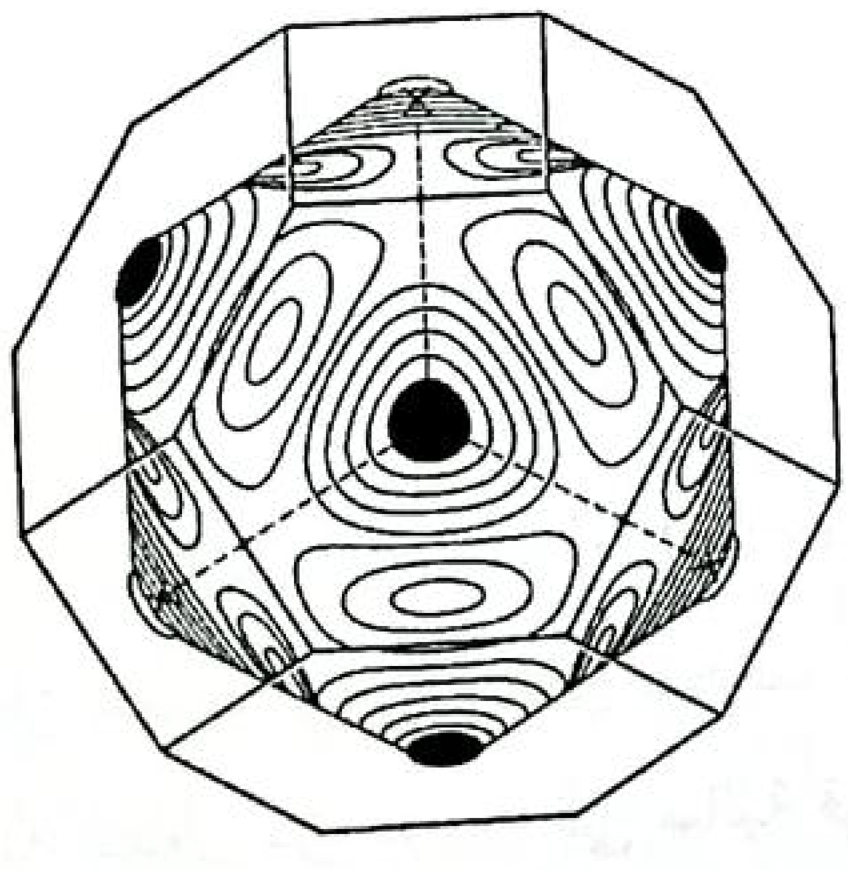
حيث

$$a_i^2 = \frac{2m_i^*\varepsilon}{\hbar^2}$$

التي تعين سطح مجسم قطع ناقص في الفضاء k عندما تكون الكتل الفعالة موجبة، وسطح مجسم قطع زائد عندما تكون إشارة إحدى الكتل مختلفة عن إشارة الكتلتين الباقيتين.

5.2- تصنيف الأجسام الصلبة وفق طيف الطاقة الإلكترونية

إن لكل الأجسام الصلبة إلكترونات ومع ذلك فلا يمكن النظر إلى هذه الإلكترونات كإلكترونات حرة تستطيع الحركة في اتجاه الحقل الكهربائي المطبق وتوصل الكهرباء. فبعض الأجسام الصلبة موصل جيد للكهرباء والبعض الآخر عازل تماماً أو نصف موصل. تتراوح المقاومة الكهربائية بين 10^{-8}أوم/سم في المعادن و 10^{22}أوم/سم في العوازل الجيدة، والنسبة 10^{30} هو أعلى حد في درجات الحرارة المنخفضة تبلغه خاصة ما من خواص الجسم الصلب. إن توزع الإلكترونات – في قطاعات طاقة تفصل بينها قطاعات ممنوعة – الناتج عن وجود الإلكترون في حقل دوري هو الذي يفسر هذا الاختلاف، الأمر الذي لا يستطيع فعله نموذج الإلكترونات الحرة الذي استعرضناه في الفصل السابق. لم يعد سطح فيرمي في الصفر المطلق سطح كرة كما في حال نموذج الإلكترون الحر وإنما ذا أشكال معقدة نتيجة تراكب قطاعات الطاقة المرتبطة بتناظر البلورة. يبين، الشكل.8، سطح فيرمي لبلورة النحاس[3] ذات البلورية المكعبة المركزية.



الشكل.8

تتعين أغلب الخواص الكهربائية والضوئية للبلورة من بنية القطاعات الطاقية ومن وضع مستوى فيرمي.

1- لنفرض في البداية وقوع مستوى فيرمي داخل قطاع طاقة مسموح بها أو أنه منطبق على الحد الأعلى لقطاع يغطيه جزئياً قطاع آخر ذو طاقة أعلى، الشكل.9. توجد في هذه الحالة مستويات طاقة خاوية قريبة من مستوى فيرمي، يكفي عندئذ تطبيق حقل كهربائي ضعيف لتنتشر الإلكترونات (متجهات الحالة)

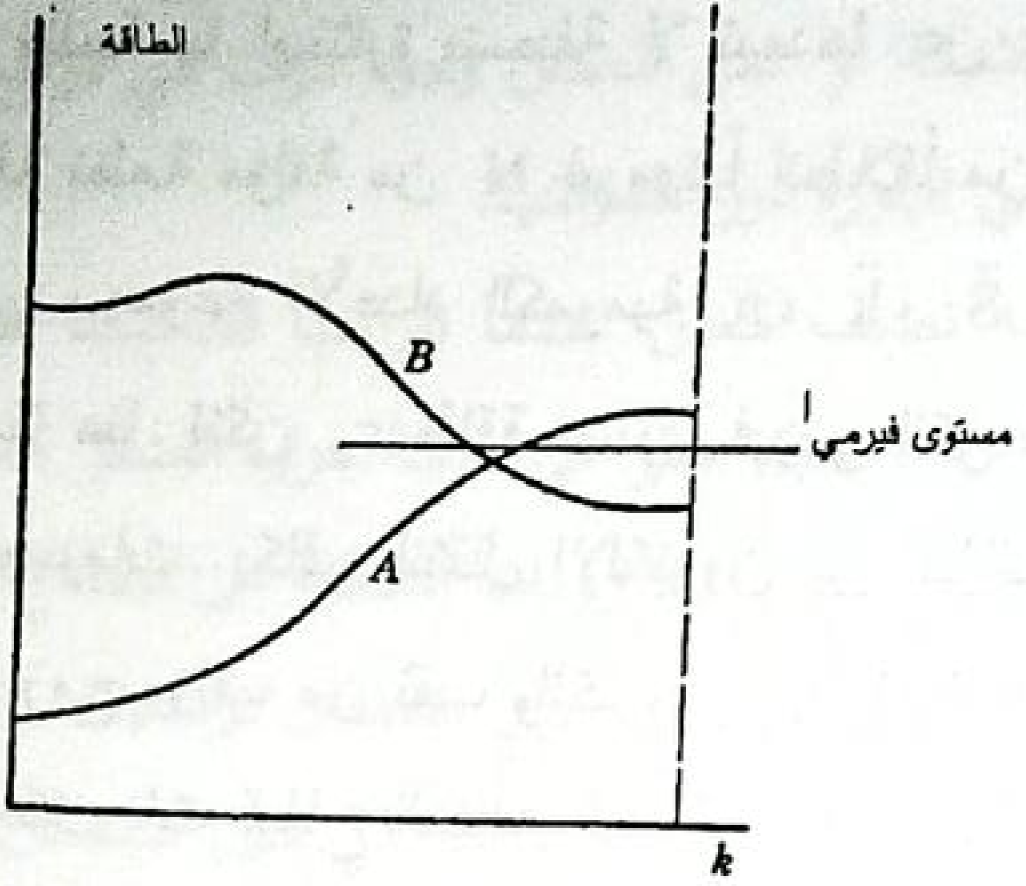
---

[3] أخذناه عن

Charles Kittel : Elementary Solid State Physics, a short course

يرجى الرجوع إلى الفصل السادس من هذا الكتاب لمن يريد الدخول في بعض التفاصيل أو الحصول على معطيات تجريبية.

حتى مستوى فيرمي وما بعده؛ وهذا هو حال المعادن : تسهم الإلكترونات ذات الطاقة القريبة من مستوى فيرمي الذي رمزنا له بـ ε_0 في التوصيل الكهربائي. تسمى القطاعات المملوءة جزئياً قطاعات التوصيل، أما القطاع المملوء كلياً والأقرب إلى قطاع التوصيل فيسمى قطاع التكافؤ Valence. لا يمكن لحقل كهربائي ضعيف أن يحرك الإلكترونات إليه.



الشكل.9

تقع كل الأجسام الصلبة التي تحوي عدداً فردياً من الإلكترونات في الشبيكة البدائية في صنف المعادن، ذلك أن مستويات طاقة الإلكترون مزدوجة التدني بسبب السبين بمعنى أن نصف عدد مستويات الطاقة في قطاع طاقة التوصيل مشغول ولا يحتوي مستوى الطاقة $\frac{N}{2}+1$ (حيث N عدد الإلكترونات الكلي) إلا على إلكترون واحد. هذا هو حال كل المعادن القلوية، النحاس، الفضة، الذهب والألمنيوم. تحتوي شبيكة الليتيوم البدائية على ثلاثة إلكترونات يملأ الإلكترونان الأولان القطاع S^1 والثالث نصف القطاع S^2.

2- لنفرض الآن تطابق مستوى فيرمي مع الحد الأعلى لقطاع طاقة. يقع قطاع الطاقة الخاوي التالي على بعد عنه يساوي مجال الطاقة الممنوعة. لا توجد إلكترونات حرة في الصفر المطلق والجسم الصلب عازل. يجب بذل طاقة أكبر من سعة المجال الممنوع أو تساويها على الأقل للحصول على إلكترونات توصيل. تتراوح سعة هذا المجال بين 0,1ev في حالة القصدير الرمادي إلى 6-7ev في حالة الألماس الذي يبقى عازلاً جيداً في درجات الحرارة العادية. وهكذا فالعوازل أجسام صلبة تتميز باتساع مجال قطاع الطاقة الممنوعة في الصفر المطلق.

3- لنفرض أن المجال الفاصل – مجال الطاقة الممنوعة – بين القطاعات المملوءة والخاوية صغير، 1,1ev للسيليزيوم و 0,72ev للجرمانيوم. تنتقل بعض الإلكترونات في درجات الحرارة العادية من القطاع المملوء إلى قطاع التوصيل، مخلفة وراءها فراغاً، وتسهم في هذه الحالة إلكترونات القطاعين في التوصيل. ذلك أنه من الممكن عندما تكون الأمكنة الفارغة في قطاع التكافؤ صغيرة النظر إلى حركة هذه

الثقوب Holes قليلة العدد عوضاً عن النظر إلى حركة كل الإلكترونات في هذا القطاع. تزداد توصيلية الجرمانيوم والسيليزيوم بارتفاع درجة الحرارة التي تزيد من عدد الإلكترونات في قطاع التوصيل وعدد الثقوب في قطاع التكافؤ. يطلق على الأجسام الصلبة غير الموصلة في درجة حرارة الصفر المطلق والتي ترتفع التوصيلية فيها بشكل ملحوظ بارتفاع درجة الحرارة اسم أنصاف الموصلات النقية.

قلنا إننا ننظر إلى استثارة نظمة ما استثارة ضعيفة لا تبعدها عن حالة القاع كأشباه جسيمات غير متفاعلة فيما بينها. عينا حالة نظمة مؤلفة من N فيرمونياً انطلاقاً من حالة الخواء $|0\rangle$ بمتجهة الحالة $a^{\dagger}_{\lambda_1}...a^{\dagger}_{\lambda_N}|0\rangle$ حيث λ هي مجموعة الأعداد الكمومية $\vec{S}$ ، $\vec{k}$ ، n : مستوى الطاقة، متجهة الحالة والسبين في المسألة التي تهمنا هنا. لتكن ε_0 طاقة مستوى فيرمي التي ننظر إليها كحالة القاع ونرمز لها بـ ϕ_0، حيث تنعدم أشباه الجسيمات. يكافئ انتقال الإلكترون من الطاقة $\varepsilon_\lambda < \varepsilon_0$ إلى الطاقة $\varepsilon_{\lambda'} > \varepsilon_0$ إحداث شبهي جسيم، إحداث زوج مؤلف من ثقب وإلكترون و λ المقابلة للثقب هي n ، $-\vec{k}$ ، $-\vec{S}$. يعفينا هذا الإحداث من الاهتمام بإلكترونات قطاع التكافؤ الباقية. يبدو الثقب في هذا القطاع على شكل شبه جسيم مضاد. وتبدو عودة الإلكترون إلى طاقته الأولى على شكل إفناء للزوج ثقب – إلكترون. فإذا كان $a^{\dagger}_\lambda$ ، a_λ مؤثري إحداث وفناء الإلكترون فإن $b^{\dagger}_\lambda = a_{-\lambda}$ هو إحداث الثقب و $b_\lambda = a^{\dagger}_{-\lambda}$ هو إفناؤه عندما تكون $\varepsilon_\lambda \leq \varepsilon_0$. ولدينا من تعريف الخواء

$$a_\lambda|\phi_0\rangle = 0 \qquad \varepsilon_\lambda > \varepsilon_0$$
$$b_\lambda|\phi_0\rangle = 0 \qquad \varepsilon_\lambda < \varepsilon_0 \qquad (2.30)$$

إن عدد الإلكترونات هو $\sum_{\varepsilon_\lambda > \varepsilon_0} a^{\dagger}_\lambda a_\lambda$ وعدد الثقوب هو $\sum_{\varepsilon_\lambda \leq \varepsilon_0} b^{\dagger}_\lambda b_\lambda$ وهما متساويان

$$\sum_{\varepsilon_\lambda > \varepsilon_0} a^{\dagger}_\lambda a_\lambda = \sum_{\varepsilon_\lambda \leq \varepsilon_0} b^{\dagger}_\lambda b_\lambda \qquad (2.31)$$

نحسب طاقة الإلكترون انطلاقاً من طاقة فيرمي $\varepsilon^{(e)}_\lambda = \varepsilon_\lambda - \varepsilon_0 \geq 0$ وطاقة الثقب الموجبة انطلاقاً من طاقة فيرمي في الاتجاه المعاكس $\varepsilon^{(h)}_\lambda = \varepsilon_0 - \varepsilon_\lambda \geq 0$ (e للإلكترون و h للثقب).

إن متجهة حركة الثقب $(-\vec{k})$ معاكسة لحركة الإلكترون حسب العلاقة (2.16) والحصيلة عند تطبيق حقل كهربائي ضعيف هي كثافة تيار في نفس الاتجاه للثقوب والإلكترونات.

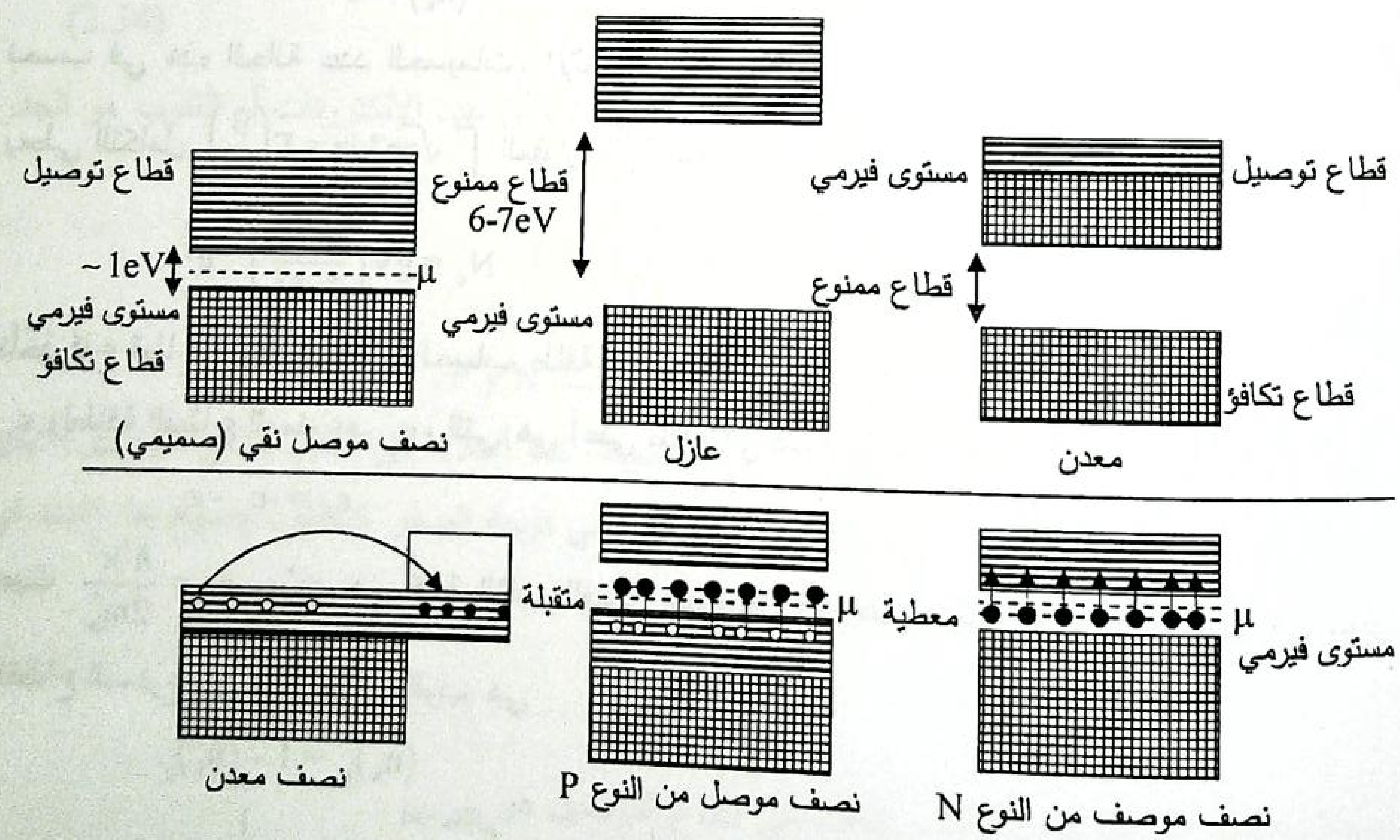
4– يطرأ أحياناً احتواء أنصاف الموصلات على شوائب، وهو أمر في غاية الأهمية لأن وجود كمية ضئيلة من الذرات الغريبة عن نصف الموصل يؤثر تأثيراً كبيراً في توصيله للكهرباء بإضافته عدداً من الإلكترونات في قطاع التوصيل أو بحذفه عدداً منها من قطاع التكافؤ وإحداث ثقوب في مكانها. عندما نضيف على سبيل المثال في بلورة السيليزيوم مقداراً صغيراً من ذرات الزرنيخ تفقد كل منها إلكتروناً يشغل في درجات الحرارة العادية موقعاً في قطاع توصيل السيليزيوم وهكذا ترتفع توصيلية السيليزيوم بازدياد عدد ذرات الزرنيخ وارتفاع درجة الحرارة. يطلق على الذرات الغريبة في هذه الحالة اسم الذرات المعطية donors وعلى نصف الموصل اسم نصف موصل من النوع N (توصيل بالإلكترونات). أما عندما

تتضاف إلى السيليزيوم ذرات البور فإنها تلتقط من قطاع التكافؤ عدداً من الإلكترونات مخلفة ثقوباً في هذا القطاع. يطلق على ذرات البور اسم الذرات المتقبلة Acceptors. وعلى نصف الموصل اسم نصف موصل من النوع P (توصيل بالثقوب)؛ N شحنة سالبة و P شحنة موجبة.

ليس من الضروري أن تكون المعطيات والمتقبلات شوائب، يمكن لخلل ما في تجانس البلورة القيام بهذا الدور كفقدان بعض الذرات في الشبكة أو على العكس وجود ذرات في مواقع جديدة غير المواقع العقدية في الشبيكة، الخ؛ تلعب العيوب في البلورة دور الشوائب.

5- نقول عن الجسم الصلب إنه نصف معدن عندما تتراكب قطاعات التوصيل والتكافؤ جزئياً، تمر إلكترونات قطاع التكافؤ إلى قطاع التوصيل حتى في درجة حرارة الصفر المطلق. ترتفع توصيلية نصف المعدن بارتفاع درجة الحرارة مع ازدياد عدد الإلكترونات المنتقلة من القطاع الأول إلى الثاني وازدياد عدد الثقوب التي تخلفها وراءها، على خلاف المعدن الذي تنخفض توصيلته بارتفاع درجة الحرارة لأن عدد إلكترونات قطاع التوصيل مستقل عن درجة الحرارة، هذا في حين تنخفض طاقة الإلكترون الحركية مع ارتفاع درجة الحرارة نتيجة تفاعله مع الفونون.

تلخص مخططات، الشكل.10، ما جاء في هذا الرقم



الشكل.10

6.2– تعيين الكمون الكيميائي

كتبنا في التقريب شبه التقليدي لغاز وحيد الذرات ((3.29).1) الكمون الكيميائي على الشكل

$$\mu = T\ln\frac{N}{V}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mT}\right)^{3/2}$$

نكتب $\frac{N}{V}$ بدليل طاقة فيرمي ((3.1,2).2)

$$\mu = T\ln\frac{gp_0^3}{6\pi^2\hbar^3}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mT}\right)^{3/2}$$

$$= T\ln\frac{g\left(2m\varepsilon_0\right)^{3/2}}{6\pi^2\hbar^3}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mT}\right)^{3/2}$$

$$\mu = T\ln g\frac{4}{3\sqrt{\pi}}\left(\frac{\varepsilon_0}{T}\right)^{3/2}$$

لنجد أن $\mu < 0$.

كتبنا كذلك في حالة درجة الحرارة المرتفعة توزع بولتزمان ((2.25).2) على الشكل

$$\langle n_k\rangle = e^{\beta(\mu - \varepsilon_k)} << 1$$

نحسب في هذه الحالة عدد الجسيمات، الإلكترونات ذات الكتلة الفعالة m^* حسب ((2.30).2) حيث يعطي التكامل $\int_0^\infty \sqrt{z}e^{-z}dz = \Gamma\left(\frac{3}{2}\right)$ المقدار $\frac{\sqrt{\pi}}{2}$ لنجد أن عدد الإلكترونات هو

$$N_e = gV\left(\frac{m^*T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} e^{\frac{\mu}{T}} \qquad (2.32)$$

نأخذ قاع قطاع التوصيل كمبدأ لحساب طاقة الثقب في قطاع التكافؤ، في المستوى $\vec{k}$ منه، نرمز لها بـ ε_h ولطاقة القطاع الممنوع بـ ε_g، التي هي أعلى طاقة في قطاع التكافؤ

$$\varepsilon_h = -\varepsilon_g - \varepsilon_k$$

حيث $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2k^2}{2m_h^*}$ و m_h^* هي كتلة الثقب الفعالة الموجبة (لأن كتلة الإلكترون الفعالة سالبة في جوار القطاع الممنوع. إن دالة توزع الثقوب هي

$$\langle n_k\rangle_h = 1 - \langle n_k\rangle_e$$

$$= 1 - \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_h - \mu)} + 1} = \frac{e^{\beta(\varepsilon_h - \mu)}}{e^{\beta(\varepsilon_h - \mu)} + 1} = \frac{1}{1 + e^{\beta(\mu - \varepsilon_h)}}$$

نهمل 1 في المخرج أمام المقدار الأسي فنحصل على

$$\langle n_k\rangle_h = e^{-\beta(\mu - \varepsilon_h)} = e^{-\beta(\mu + \varepsilon_g + \varepsilon_k)}$$

نحسب عدد الثقوب كما حسبنا عدد الإلكترونات انطلاقاً من ((2.30).2) حيث استبدلنا بالمخرج المقدار $\langle n_k \rangle_h$ لنجد أن الفارق الوحيد هو استبدال بـ $e^{\frac{\mu}{T}}$ المقدار $e^{-(\mu+\varepsilon_g)/T}$

$$N_h = g_h V \left(\frac{m_h^* T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{\mu+\varepsilon_g}{T}} \qquad (2.33)$$

و g_h هو تدني الطاقة ε_h.

إن N_h تساوي N_e في أنصاف الموصلات النقية الصميمية، ومنه

$$e^{\frac{2\mu+\varepsilon_g}{T}} = \frac{g_h}{g} \left(\frac{m_h^*}{m^*} \right)^{3/2}$$

و

$$\mu = -\frac{1}{2}\varepsilon_g + \frac{1}{2} T \, Ln \frac{g_h}{g} \left(\frac{m_h^*}{m^*} \right)^{3/2}$$

إن الحد الثاني مهمل أمام الحد الأول عندما لا تكون درجة الحرارة بالغة الارتفاع بحيث يمكننا القول : يقع كمون إلكترونات قطاع التوصيل الكيميائي، في حالة نصف الموصل النقي، في وسط القطاع الممنوع وهو يساوي كمون ثقوب قطاع التكافؤ الكيميائي

$$\mu = -\frac{1}{2}\varepsilon_g \qquad (2.34)$$

يمكننا من جهة أخرى التخلص من الكمون الكيميائي بأن نكتب أن عدد الإلكترونات أو الثقوب هو الجذر التربيعي لجداء المقدارين (2.32) و (2.33)

$$N_e = N_h = V\sqrt{g g_h} \left(\frac{m^* m_h^*}{4\pi^2\hbar^4} \right)^{3/2} T^{3/2} e^{-\frac{\varepsilon_g}{2T}}$$

لنحسب الآن الكمون الكيميائي في حالتي أنصاف الموصلات N و P.

نرمز لطاقة الإلكترون المعطي السالبة بـ $-\varepsilon_d$، المحسوبة، كما أعلاه، من أسفل قطاع التوصيل؛ ليكن $N_d^{(0)}$ عدد إلكترونات الشوائب الموجودة في هذا المستوى في درجة الصفر المطلق، يصبح هذا العدد في درجة الحرارة T، N_d المعين بتوزع فيرمي

$$N_d = \frac{N_d^{(0)}}{e^{-\frac{\varepsilon_d+\mu}{T}} + 1}$$

وبالتالي فإن عدد الإلكترونات التي انتقلت إلى قطاع التوصيل هو

$$n_d = N_d^{(0)} - N_d = \frac{N_d^{(0)}}{1 + e^{\frac{\varepsilon_d+\mu}{T}}}$$

لكن عدد هذه الإلكترونات معطى بالعلاقة (2.32)، أي أن

$$gV \left(\frac{m^* T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} e^{\frac{\mu}{T}} = \frac{N_d^{(0)}}{1 + e^{\frac{\varepsilon_d+\mu}{T}}} \qquad (2.35)$$

لم ندخل الثقوب في هذا العدد لأن المعامل $e^{\frac{\varepsilon_g}{T}}$ في (2.33) صغير جداً أمام 1. إن هذه العلاقة معادلة من الدرجة الثانية بـ $e^{\frac{\mu}{T}}$، لا نأخذ في حلها إلا الحل بإشارة + أمام المميز ونكتب

$$\mu = -\varepsilon_d + TLn\frac{1}{2}\left(\sqrt{1 + \frac{4N_d^{(0)}}{gV}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{m^*T}\right)^{3/2} e^{\frac{\varepsilon_d}{T}}} - 1\right)$$

يغلب الحد بـ $e^{\frac{\varepsilon_d}{T}}$ على 1 في درجات الحرارة المنخفضة جداً، نخرجه من تحت إشارة الجذر ونكتب

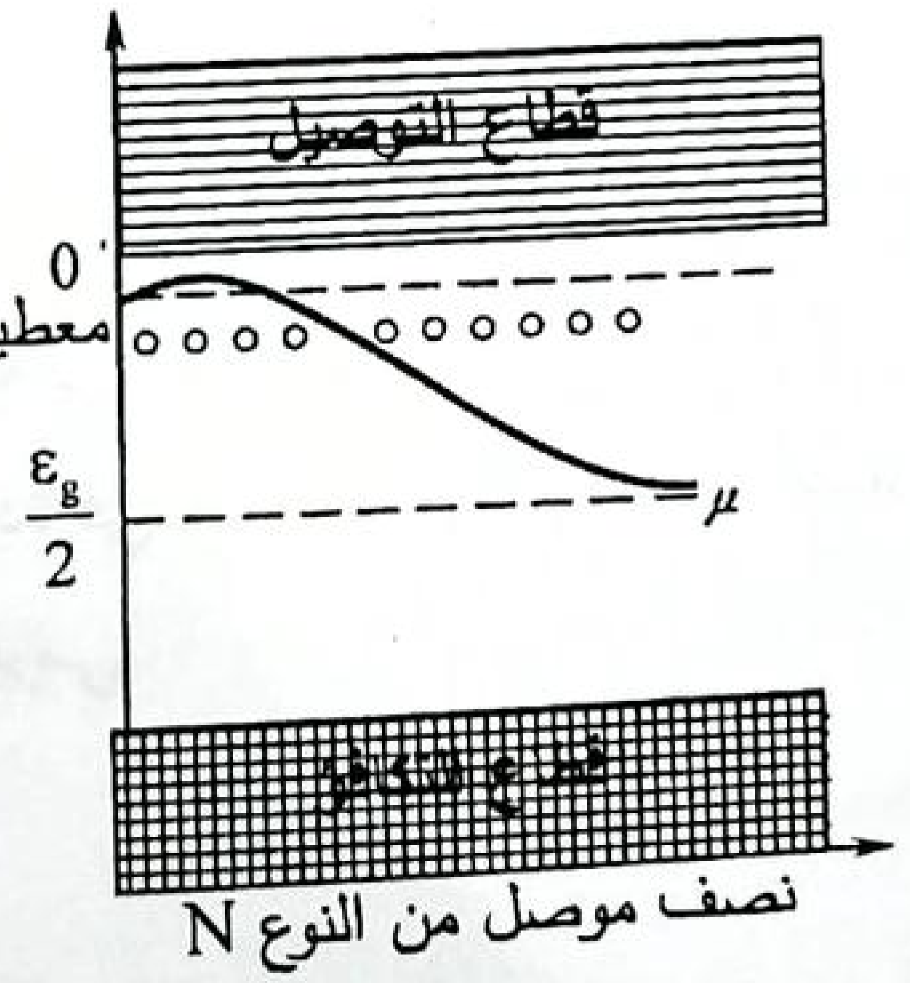
$$\mu = -\varepsilon_d + T\frac{1}{2}\frac{\varepsilon_d}{T} + TLn\frac{1}{2}\sqrt{\frac{4N_d^{(0)}}{gV}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{m^*T}\right)^{3/2}}$$

$$= -\frac{\varepsilon_d}{2} + TLn\frac{1}{2}\sqrt{\frac{4N_d^{(0)}}{gV}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{m^*T}\right)^{3/2}} \qquad (2.36)$$

يقع μ في منتصف المجال الفاصل بين مستوى الشوائب المعطية وقاع قطاع التوصيل في درجة الصفر المطلق. لكنه يعود فينخفض بعد أن يصل إلى نهاية عظمى مع ارتفاع درجة الحرارة بحيث يلزم أخذ الانتقال بالثقوب بين قطاع التكافؤ وقطاع التوصيل بعين الاعتبار وكتابة العلاقة التالية عوضاً عن (2.35)

$$gV\left(\frac{m^*T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} e^{\frac{\mu}{T}} = g_h V\left(\frac{m_h^*T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} e^{-\frac{\mu+\varepsilon_g}{T}} + \frac{N_d^{(0)}}{1 + e^{\frac{\varepsilon_d+\mu}{T}}}$$

وهي معادلة متسامية. يرتفع دور الحد الأول الأسي المتناقص في الطرف الثاني بارتفاع درجة الحرارة لنصل إلى حالة نصف الموصل النقي والعلاقة (2.34). يبين المخطط، الشكل.11، مظهر تغيرات μ بتغير درجات الحرارة



الشكل.11

يمكن على نفس النحو حساب الكمون الكيميائي في حالة نصف الموصل من النوع P. نرمز بـ $N_a^{(0)}$ لعدد مستويات الطاقة المتقبلة ذات الطاقة – المقيسة من قاع قطاع التوصيل – $-\varepsilon_g + \varepsilon_a$ حيث ε_a هي طاقة المستوى المتقبل $\varepsilon_g >> \varepsilon_a$. نجد على غرار (2.36)

$$\mu = -\varepsilon_g + \frac{1}{2}\varepsilon_a + TLn\sqrt{\frac{N_a^{(0)}}{g_h V}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{m_h^* T}\right)^{3/2}} \quad (2.37)$$

يقع الكمون الكيميائي في درجة الصفر المطلق في وسط المجال الفاصل بين المستويات المتقبلة وسقف قطاع التكافؤ. يزداد دور الانتقال من قطاع التكافؤ إلى قطاع التوصيل بارتفاع درجة الحرارة. يختفي دور المستويات المتقبلة شيئاً فشيئاً لنصل من جديد إلى حالة الموصل النقي والعلاقة (2.34) من الأسفل.

3. المغنطيسية الحديدية

تتمتع بعض المعادن التي لم تكتمل فيها الطبقات ^3D و ^4F (الحديد، الكوباكت والنيكل) بوجود تمغنط عفوي لا مثيل له في المغنطيسية المسايرة. ذلك أن إلكترونات الطبقة ^4F الواقعة في عمق الأيونات في المواد ذات المغنطيسية المسايرة (الترِبات النادرة) محاطة بالطبقتين الخارجيتين ^5S و ^5P اللتين تشكلان حاجزاً بينها وبين الوسط الخارجي. بينما تقع إلكترونات الطبقة ^3D في زمرة المعادن الحديدية أبعد ما يمكن عن النواة وتتأثر تأثراً شديداً بالحقل الكهربائي – الذي سنبين منشأه – الناتج عن الإيونات المجاورة، وبشكل أكثر تحديداً عن الطبقات ^3D و ^4F غير الممتلئة. نعلم أن L^2 و L_z ثابتتان عندما يكون الحقل مركزياً. ولكن حقل الإيونات غير متجانس وبالتالي فإن مسقط العزم الزاوي المداري على محور ما z، يعينه الحقل المغنطيسي، لم يعد ثابتاً وقيمته الوسطية $\langle L_z \rangle = 0$. وهكذا فإن $\vec{J} = (\vec{L} + 2\vec{S})$ لم يعد صالحاً لدراسة المغنطيسية الحديدية ليحل محله السبين وحده. لذا يقال إن العزم المداري "ينطفئ" في المغنطيسية الحديدية.

1.3– التفاعل الكهربائي بين السبينات

يحدث العزم المغنطيسي الملازم للعزم الزاوي الصميمي (السبين) حقلاً مغنطيسياً يتفاعل مع العزوم المغنطيسية للسبينات المجاورة – تفاعلات بين ثنائي قطب وآخر مجاور له –، وهو تفاعل ضعيف كما نعلم، ثابتة الاقتران فيه من رتبة ثابتة التفاعل التقليدي المتناسبة مع $\frac{1}{r^3}$، لا تظهر مفاعيله إلا في البنية زائدة الدقة للطيف (((§1.5).4).IV). لا يلعب هذا التفاعل أي دور في المغنيطسية الحديدية الناشئة عن خاصة الفيرميونات الأساسية : استحالة وجود فيرميونين في ذات الحالة الكمومية، المعينة بالوضع وباتجاه السبين، المعبر عنها بمبدأ الاستبعاد وبالتكميم بالمبادل المضاد لمؤثرات الخلق والفناء ((23'،(2.23).6).IV). نكتب هاميلتوني التفاعل بين الجسيمات زوجاً زوجاً الذي أثبتناه في ((3.23).6).IV) آخذين بعين الاعتبار قيم السبين على الشكل $\frac{1}{2}\sum V a^\dagger_{\sigma_1} a^\dagger_{\sigma_2} a_{\sigma_2} a_{\sigma_1}$ حيث $\sigma = \pm 1$ تعين اتجاه السبين نحو الأعلى أو الأسفل على محور ما، فنرى أن عنصر الهاميلتوني

أي أن السبينات من ذات $\sigma'_2 = \sigma_1$ أو $\sigma'_1 = \sigma_2$ عندما يكون مضاد التناظر (أياً كانت قيم الاندفاع) اتجاه السبين لا تتفاعل فيما بينها : لا يعثر الجسيم جسيماً آخر من ذات إشارة السبين ويبقى الجسيمان بعيدين عن بعضهما؛ لا يمكن لفيرميون أن يقترب بما فيه الكفاية من فيرميون آخر ليتفاعل معه إلا إذا كانت حالتهما الكمومية مختلفة، إذا كان سبيناهما مختلفي الإشارة على محور ما – التوازي المضاد. إن بقاء فيرميونين متوازيي السبين بعيدان عن بعضهما يحدث بين شحنتيهما تفاعلاً كهربائياً راكداً أكبر بكثير من التفاعل المغنطيسي بين العزوم يطلق عليه اسم تفاعل الاستبدال Exchange. كتبنا هاميلتوني التفاعل الكهربائي الراكد بين إلكترونين أحدهما في الحالة i، الوضع $(\vec{r}_i)$، والآخر في الحالة j، الوضع $\vec{r}_j$، في تقريب هارتري ((IV.(7.(2.26)')) على الشكل

$$\langle H_2 \rangle = \langle \psi_1^i | \langle \psi_2^j | W^{ij} (I - P_{ij}) | \psi_1^j \rangle | \psi_2^i \rangle$$

حيث P_{ij} مؤثر الاستبدال. عبرنا من جهة أخرى ('(IV.4.(1.42)') عن مؤثر الاستبدال بدليل السبين

$$\vec{S} = \frac{1}{2}\vec{\sigma}$$

$$P_{ij} = \frac{1 + \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j}{2} = \frac{1}{2} + 2\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

لنرمز بـ J للتكامل

$$J = \langle \psi_1^i | \langle \psi_2^j | W^{ij} | \psi_1^j \rangle | \psi_2^i \rangle = \int \overline{\psi_1^i \psi_2^j} W^{ij} \psi_1^j \psi_2^i d\vec{r}_i d\vec{r}_j$$

ونكتب $\langle H_2 \rangle$ على الشكل

$$\langle H_2 \rangle = \frac{J}{2} - 2J\vec{S}_i\vec{S}_j$$

ليكن لدينا إذاً جسم صلب مكون من N ذرة متطابقة موزعة بشكل منتظم على شبيكات الجسم ولنفرض أن للذرة سبيناً ألكترونياً نرمز له بـ $\vec{S}$ وبالتالي عزماً مغنطيسياً $\vec{M} = g\mu_B\vec{S}$ حيث μ_B مغناتون بور و g ثابتة لاندي. إن هاميلتوني الجسم عندما يطبق عليه حقل مغنطيسي خارجي $\vec{B}_0$، نحدد اتجاهه بالمحور Oz، هو

$$H_0 = -g\mu_B \sum_{j=1}^{N} \vec{S}_j \cdot \vec{B}_0 = -g\mu_B \sum_{j=1}^{N} S_{j_z} B_0 \tag{3.1}$$

نكتب هاميلتوني تفاعل الاستبدال بين ذرتين j و k على شكل اضطراب

$$H'_{jk} = -2J\,\vec{S}_j \cdot \vec{S}_k \tag{3.2}$$

حيث الوسيط J تابع لتباعد الذرتين، نفرضه موجباً لكي يبلغ الهاميلتوني حده الأدنى عندما يكون السبينان j و k متوازيين : حالة التوازن وهي الحالة الأنسب لإحداث المغنطيسية الحديدية. يتناقص J بسرعة كبيرة عندما تتباعد الإلكترونات المنتمية إلى ذرات مختلفة عن بعضها على نحو يجعل التفاعل مقتصراً، من أجل سبين إلكتروني ينتمي إلى الذرة j مثلاً، على n ذرة مجاورة، $k = 1, 2, \ldots n$.

نكتب هاميلتوني تفاعل الاستبدال الكلي على الشكل

$$H' = \frac{1}{2}\left(-2J\sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{n} S_{j_z} S_{k_z}\right) \quad (3.3)$$

حيث J هي ثابتة الاستبدال من أجل جوار مقتصر على n ذرة، وكالمعتاد وضعنا $\frac{1}{2}$ حتى لا يتكرر التفاعل بين ذرتين.

علينا الآن حساب المقادير الترموديناميكية، حساب العزم المغنطيسي الوسطي $\langle M \rangle$ بدليل درجة الحرارة والحقل الخارجي المطبق، لهذه النظمة ذات الهاملتوني

$$H = H_0 + H' \quad (3.4)$$

ليس لهذه المسألة حل حتى الآن من أجل شبكة بلورية لا على التعيين. يوجد حل مضبوط من أجل شبكة سبينات نظرية ببعدين فقط وفي حال انعدام الحقل الخارجي $\vec{B}_0$.

2.3– تقريب الحقل الجزيئي Molecular لـ فيس Weiss

لنركز انتباهنا على هاميلتوني الذرة j التي ننظر إليها كذرة مركزية :

$$h' = -2JS_{j_z}\sum_{k=1}^{n} S_{k_z} \quad (3.5)$$

ولنتصوره على شكل طاقة تفاعل بين العزم المغنطيسي للذرة j وحقل مغنطيسي وسطي (في اتجاه Oz) نرمز له بـ B_m. نتصور h' إذاً على الشكل

$$h' = -2JS_{j_z}\left\langle \sum_{k=1}^{n} S_{k_z} \right\rangle = -g\mu_B S_{j_z} B_m \quad (3.5)'$$

حيث

$$B_m = \frac{2J}{g\mu_B}\left\langle \sum_{k=1}^{n} S_{k_z} \right\rangle \quad (3.6)$$

يطلق على هذا الحقل اسم الحقل الجزيئي أو الحقل الداخلي. يذكرنا هذا التقريب بتقريب الحقل المركزي الذي عالجناه في ميكانيك الكم (((IV.(7.§2.3) وبضرورة اختياره بحيث يكون متسقاً ذاتياً Selfconsistent، أي بحيث يعين هذا الحقل توزيعاً للسبينات في الفضاء يتواءم مع هذا الحقل وينتجه في آن واحد. وهكذا فإن هاميلتوني الذرة j هو

$$h = h_0 + h' = -g\mu_B S_{j_z}\left(B_0 + B_m\right) \quad (3.7)$$

لقد حل الحقل المغنطيسي الفعال B_m محل مفعول الـ n ذرة المجاورة للذرة j وأعاد المسألة إلى تفاعل العزم المغنطيسي للذرة j مع حقل خارجي $B_0 + B_m$، إلى مسألة المغنيطسية المسايرة التي عالجناها في الفصل الأول. حسبنا القيمة الوسطية للعزم الزاوي (السبيني) بدليل دالة بريللوان ((1.(3.7)

$$\langle S_{j_z} \rangle = S\mathscr{B}_S(\eta) \qquad (3.8)$$

حيث $\eta = \beta g\mu_B (B_0 + B_m)$ و $S_{j_z} = -S, -S+1, ..., S$

هذه القيمة الوسطية صحيحة بطبيعة الحال أياً كانت الذرة j التي نظرنا إليها كذرة مركزية وهكذا فإن الاتساق الذاتي يتطلب تطابق تعريفي القيمة الوسطية لـ B_m في (3.6) و(3.8) :

$$g\mu_B B_m = 2JnS\mathscr{B}_S(\eta)$$

وبكتابة B_m بدليل η : $B_m = \frac{\eta}{\beta g\mu_B} - B_0$ تصبح علاقة الاتساق

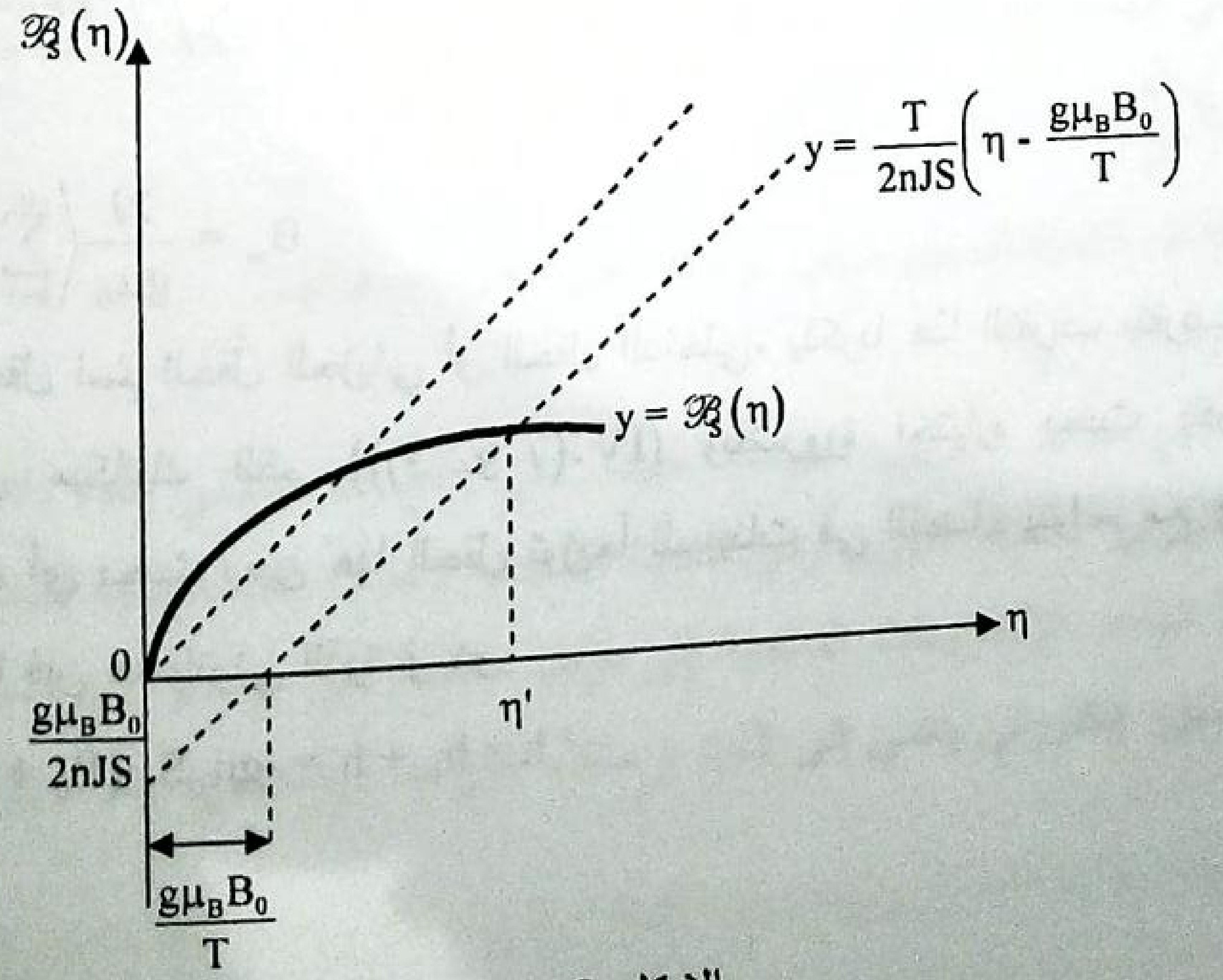
$$\mathscr{B}_S(\eta) = \frac{T}{2nJS}\left(\eta - \frac{g\mu_B B_0}{T}\right) \qquad (3.9)$$

تحدد هذه العلاقة قيمة η وبالتالي قيمة الحقل الجزيئي B_m، ولدينا في حالة انعدام الحقل الخارجي $B_0 = 0$

$$\mathscr{B}_S(\eta) = \frac{T\eta}{2nJS} \qquad (3.9)_0$$

نحل المعادلة (3.9) بيانياً. إنها تقاطع منحني بريللوان $y = \mathscr{B}_S(\eta)$ مع المستقيم $y = \frac{T}{2nJS}\left(\eta - \frac{g\mu_B B_0}{T}\right)$. تعين نقطة التقاطع η'، الشكل.12، قيمة الحقل الجزيئي من جهة والعزم المغنطيسي الوسطي الكلي، الذي نرمز له بـ $\langle M_z \rangle$ من جهة أخرى

$$\langle M_z \rangle = Ng\mu_B \langle S_{j_z} \rangle = Ng\mu_B S\mathscr{B}_S(\eta) \qquad (3.10)$$



الشكل.12

نلاحظ أنه من الممكن في حال انعدام الحقل الخارجي أن يكون للمعادلة $(3.9)_0$ حل آخر إضافة للحل $\eta = 0$، أي أن يتقاطع $\mathscr{B}_S(\eta)$ مع المستقيم $\frac{T\eta}{2nJS}$ في نقطة "η"، أن يقع هذا المستقيم تحت مماس المنحني في النقطة O :

$$\left.\frac{d\mathscr{B}_S}{d\eta}\right|_{\eta=0} > \frac{T}{2nJS} \qquad (3.11)$$

يقابل ذلك وجود تمغنط عفوي وهو ما يميز المغنطيسية الحديدية.

رأينا (1.§3.1) أن $\mathscr{B}_S(\eta)$ متناسب مع $\frac{1}{3}(S+1)\eta$ عندما تكون $\eta << 1$، وهو ما يتواءم مع انعدام الحقل الخارجي؛ ويصبح شرط التمغنط العفوي (3.11)

$$\frac{1}{3}(S+1) > \frac{T}{2nJS}$$

يجب إذاً لكي تظهر المغنطيسية الحديدية أن تكون درجة الحرارة أصغر من درجة حرارة حدية، درجة حرارة حرجة تحددها العلاقة

$$T_C = \frac{2nJS(S+1)}{3} \qquad (3.12)$$

وهي درجة حرارة كوري Curie.

نكتب دالة بريللوان بوجود حقل مغنطيسي خارجي $\vec{B}_0$ صغير؛ η صغيرة جداً، و

$$\mathscr{B}_S(\eta) = \frac{(S+1)}{3}\eta = \frac{T}{2nJS}\left(\eta - \frac{g\mu_B B_0}{T}\right)$$

ومنه نظراً لـ (3.12)

$$\eta = \frac{g\mu_B B_0}{T - T_C} \qquad (3.13)$$

نضع هذه القيمة في التقريب $\mathscr{B}_S(\eta) = \frac{S+1}{3}\eta$ من أجل η صغيرة جداً فنحصل من (3.10) على العزم المغنطيسي الوسطي

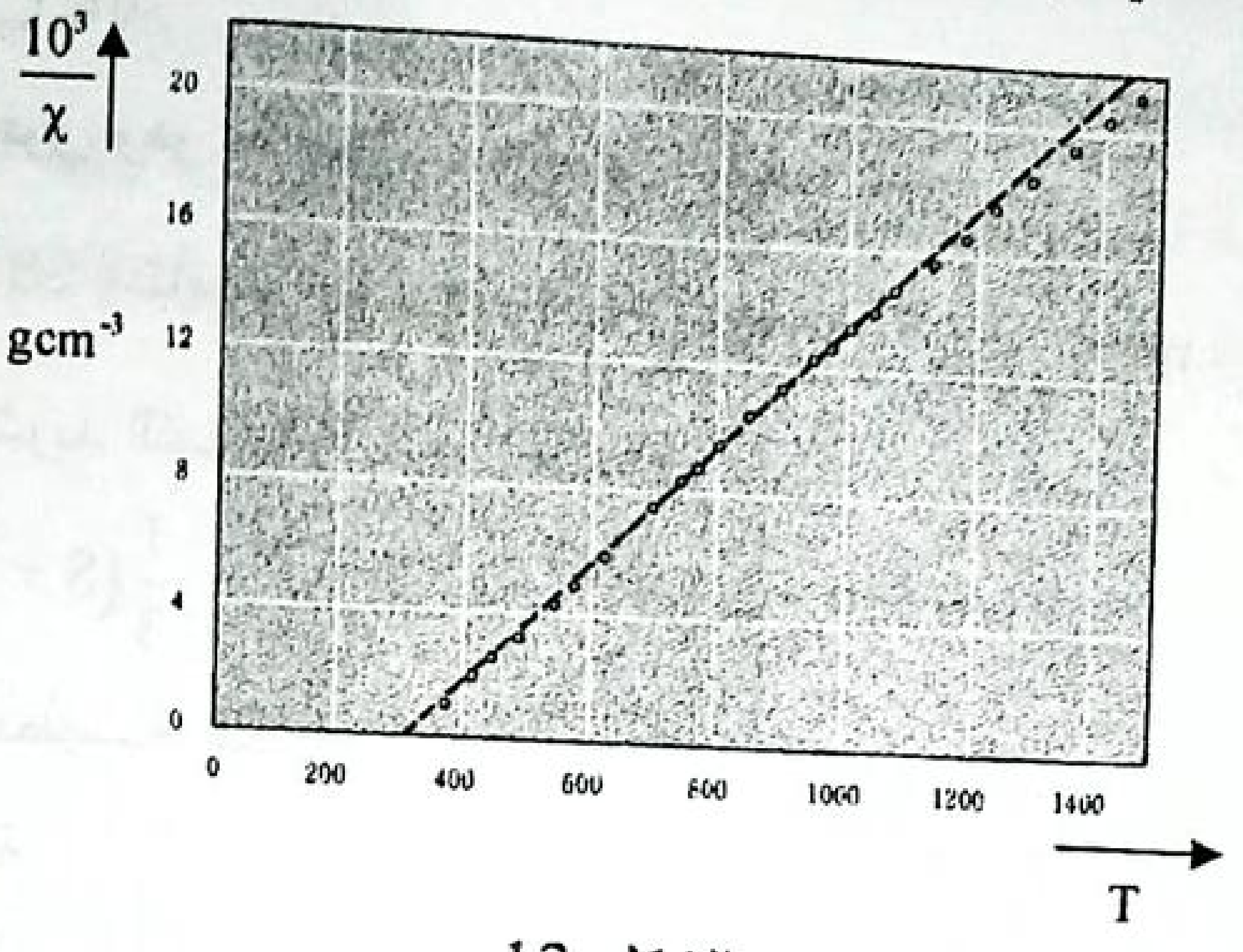
$$\langle M_z \rangle = Ng\mu_B \mathscr{B}_S(\eta) = Ng\mu_B \frac{S(S+1)}{3}\frac{g\mu_B B_0}{T - T_C}$$

ومنه القابلية المغنطيسية (نسبة التمغنط في واحدة الحجوم على الحقل المطبق عندما يتناهى الحقل نحو الصفر)

$$\chi = \frac{\langle M \rangle}{VB_0} = \frac{N_0 g^2 \mu_B^2 S(S+1)}{3(T - T_C)} \qquad (3.14)$$

حيث N_0 عدد الذرات في واحدة الحجوم $N_0 = \frac{N}{V}$. تعرف هذه العلاقة باسم قانون فيس-كوري. تتناهى القابلية المغنطيسية إلى اللانهاية عندما تسعى درجة الحرارة نحو T_C : $T \to T_C$ أي عندما تصبح المادة حديدية المغنطيسية.

يتفق قانون فيس-كوري مع النتائج التجريبية بشكل جيد عندما تكون درجة الحرارة أعلى من درجة حرارة كوري T_C. يرينا المستقيم، الشكل.13، تغيرات χ^{-1} بدليل T لغرام من معدن الغادولينيوم Gadolinium ولا يختلف عن القيم التجريبية إلا قليلاً في درجات الحرارة المرتفعة ولكنه يعين قيمة لـ T_C (في النقطة $\frac{1}{\chi} = 0$) هي 310°K بينما هي في واقع الأمر تساوي 289°K.



الشكل.13

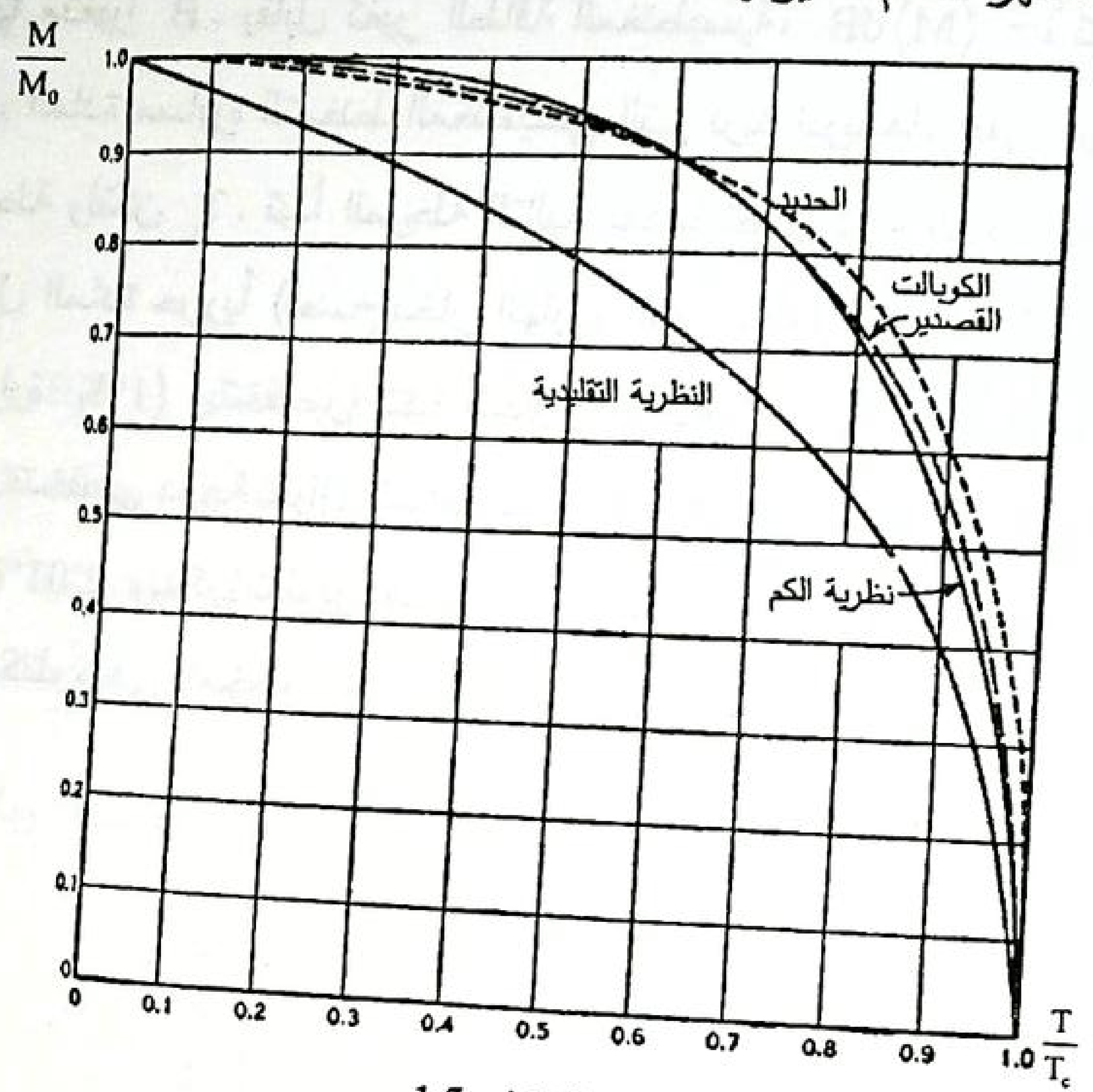
إن وجود الحقل الجزيئي $B_m \neq 0$ يجعل الهاميلتوني أصغرياً وحالة المغنطيسية الحديدية حالة مستقرة تصطف فيها السبينات متوازية فيما بينها. ينخفض ميل المستقيم $y = \frac{T\eta}{2nJS}$ مع انخفاض درجة الحرارة إلى أن ينطبق على المحور η من أجل $T = 0$ ويتقاطع مع المنحني $\mathscr{B}_S(\eta)$ في اللانهاية حيث $\mathscr{B}_S(\eta) \underset{\eta\to\infty}{\to} 1$. هذا يعني حسب (3.10) أن كل السبينات أصبحت متوازية – الترتيب التام الواجب في درجة الحرارة $T = 0$ حيث تنعدم الأنتروبية أيضاً : عدد الحالات المتاحة يساوي 1.

لنلاحظ أن قولنا باستقرار حالة المغنطيسية الحديدية لا ينطبق إلا على بلورات صغيرة، على منطقة من مناطق فيس، إذ ينقسم الجسم البلوري الجهري إلى عدد كبير من هذه المناطق، الشكل.14. Domain

الشكل.14

تأخذ السبينات المتوازية اتجاهات مختلفة بين منطقة وأخرى، وقد تكون الحصيلة انعدام التمغنط العفوي للعينة المدروسة. يتوقف وجود تمغنط عفوي على خواص التناظر للشبيكة، على وجود محور تمغنط سهل

وعلى مسائل عديدة ومعقدة أخرى كتغير السبين على الحدود بين المناطق والحرارة النوعية في جوار نقطة كوري، الخ. وهي مسائل لا يوجد حل مرض لكثير منها حتى الآن ولهذا فإن المنحني الذي يعين تغيرات $\frac{M}{M_0}$ بدليل $\frac{T}{T_C}$ لا ينطبق على المعطيات التجريبية، الشكل.15، وهكذا فإن مناطق فيس التقليدية وتقريب الحقل المركزي الذي أعطيناه ليسا سوى تقريبين خشنين استطاعا تحديد الصفات الأساسية للمغنطيسية الحديدية والمظهر العام لتغيراتها.



الشكل.15

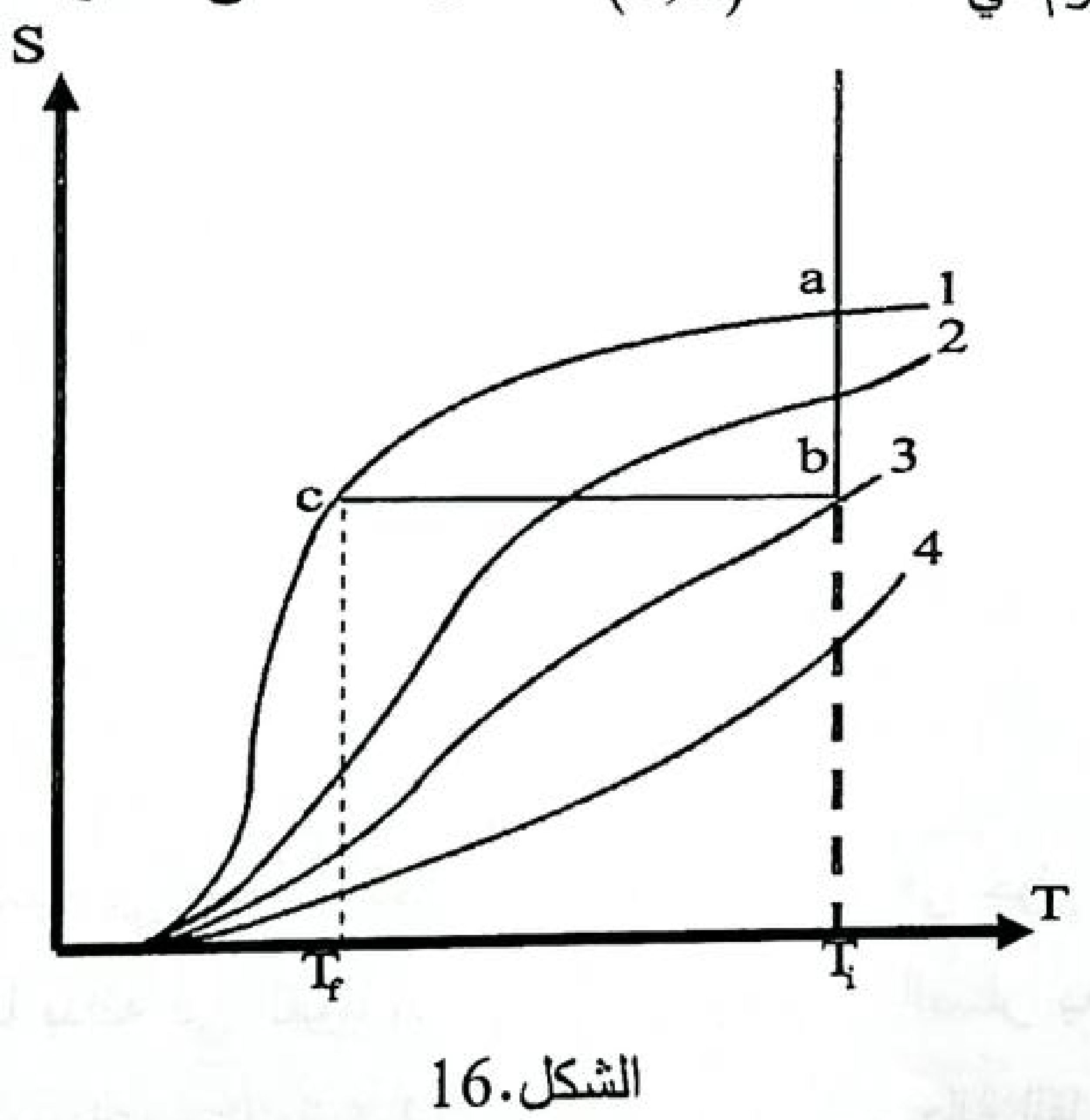
3.3- التبريد المغنطيسي الكظوم

تكتسي دراسة الظواهر الفيزيائية في درجات الحرارة المنخفضة جداً – في جوار الصفر المطلق – أهمية خاصة تجعل منها فرعاً قائماً بذاته في الفيزياء. ذلك أن الاقتراب من الصفر يعني الاقتراب من الترتيب والنظام التامين : تصطف السبينات متوازية كما رأينا، تحتل البوزونات حالة القاع وتقع طاقة الفيرميونات في "كرة" فيرمي $\frac{4\pi}{3}p_0^3$ وتكف ذرات الجسم الصلب عن الاهتزاز، الخ. تظهر في درجات الحرارة المنخفضة أطوار جديدة للمادة كفائقة سيولة الهيليوم ^4He – انعدام اللزوجة – وفائقية التوصيل – انعدام المقاومة الكهربائية –، رغم أن فائقية التوصيل تقع أيضاً في درجات الحرارة المرتفعة نسبياً (في درجة حرارة الآزوت السائل، 100°K).

إن درجة حرارة تميع الهيليوم العادي هي 4,2°K في الضغط الجوي العادي ويمكن تخفيضها إلى 1°K بضخ بخار الهيليوم المتجمع فوق المائع وبالتالي تخفيض الضغط إلى أقصى حد ممكن إذ ينقص هذا

التخفيض درجة حرارة الغليان كما نعلم. يمكن إذاً استعمال الهليوم كمحم نضع فيه المادة المراد تبريدها حتى هذه الدرجة؛ كما يمكن استعمال النظير النادر[4] ^{3}He لبلوغ الدرجة $0,3°K$. تستعمل طريقة التبريد المغنطيسي لبلوغ درجات حرارة أشد انخفاضاً، وهي طريقة تماثل التبريد الميكانيكي المعروف : انضغاط متساوي الدرجة للغاز المحاط بمحم يحفظ درجة الحرارة متبوع بعزل حراري وتمدد كظوم للغاز يخفض درجة حرارته. نضع المادة مسايرة التمغنط التي نريد تبريدها في محم درجة حرارته $1°K$ تقريباً ونطبق عليها حقلاً مغنطيسياً متغيراً $\vec{B}$. يقابل تغير الطاقة المغنطيسية، $-\langle M\rangle dB$، تغير الطاقة الميكانيكية، $-pdV$، $\langle M\rangle$ عزم المادة مسايرة التمغنط المغنطيسي التي نريد تبريدها. تبقى درجة الحرارة ثابتة بفضل المحم أثناء هذه المرحلة ولتكن T_i. تبدأ المرحلة التالية عندما تصل شدة الحقل المغنطيسي، الذي ابتدأ بـ $B_0 = 0$ إلى B_i بعزل المادة حرارياً (بضخ بخار الهليوم الذي استعمل لوضع المادة في تماس حراري مع المحم ذي درجة الحرارة $1°K$) وبتخفيض شدة الحقل B_i ببطء شديد – تحول شبه عكوس – إلى أن تنعدم تماماً $B_f = 0$. تنخفض درجة حرارة المادة نتيجة إزالة التمغنط الكظومة إلى T_f الأصغر بمئة مرة من T_i، أي بحدود $0,01°K$ ويمكن تطوير هذه العملية لنصل إلى $T_f = 10^{-6}°K$.

يمكن توضيح التبريد الكظوم في المخطط (T, S)، الشكل.16، على النحو التالي :



الشكل.16

تتناقص أنتروبية المادة مسايرة المغنطيسية بارتفاع شدة الحقل وبقاء درجة الحرارة ثابتة لأن العزوم المغنطيسية للذرات تصطف أكثر فأكثر في اتجاه الحقل فينخفض عدد الحالات المتاحة لها وتنقص عشوائية التوزع. يبين المخطط تغيرات $S(T, B)$ من أجل عدة حقول مغنطيسية $0 = B_1 < B_2 < B_3$، إن $S \underset{T\to 0}{\to} 0$ في كل الأحوال. تنتقل عينة المادة في المرحلة الأولى من النقطة a المقابلة لـ $B_1 = 0$ إلى النقطة b المقابلة لـ $B_3 = B_i$، a و b متساويتا درجة الحرارة. تبقى الأنتروبية ثابتة في المرحلة الثانية

[4] نسبة هذا النظير إلى ^{4}He هي أقل من 10^{-6}.

الكظومة (تغير شبه عكوس) ويتمثل التحول بالانتقال من b إلى c: $S(T_i, B_i) = S(T_f, B_f)$؛ وبما أن المقدار الترموديناميكي الأساسي هو الطاقة مقسومة على درجة الحرارة $\frac{\langle M \rangle B}{T}$، عندما نهمل تفاعل العزوم المغنطيسية لذرات المادة فيما بينها فإن S تابعة في واقع الأمر لـ $\frac{B}{T}$، ولدينا

$$S\left(\frac{B_i}{T_i}\right) = S\left(\frac{B_f}{T_f}\right) \tag{3.15}$$

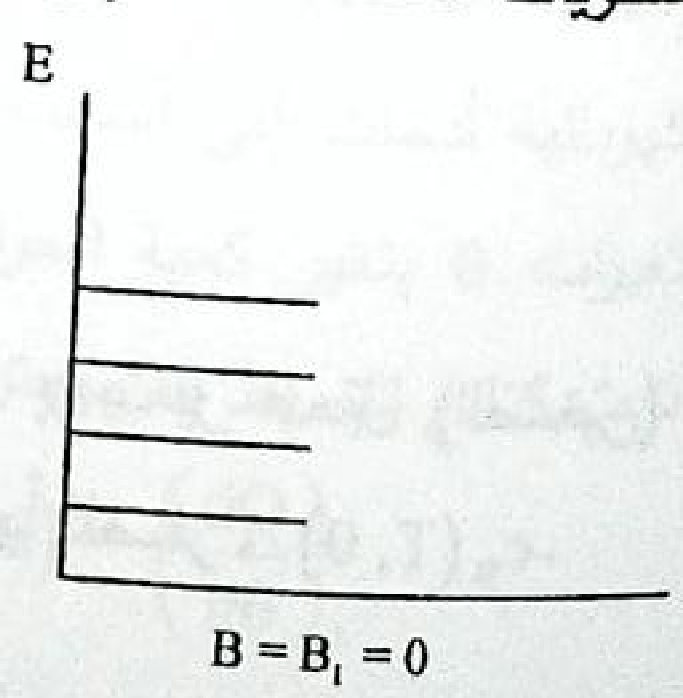
ومنه

$$\frac{B_i}{T_i} = \frac{B_f}{T_f} \tag{3.15'}$$

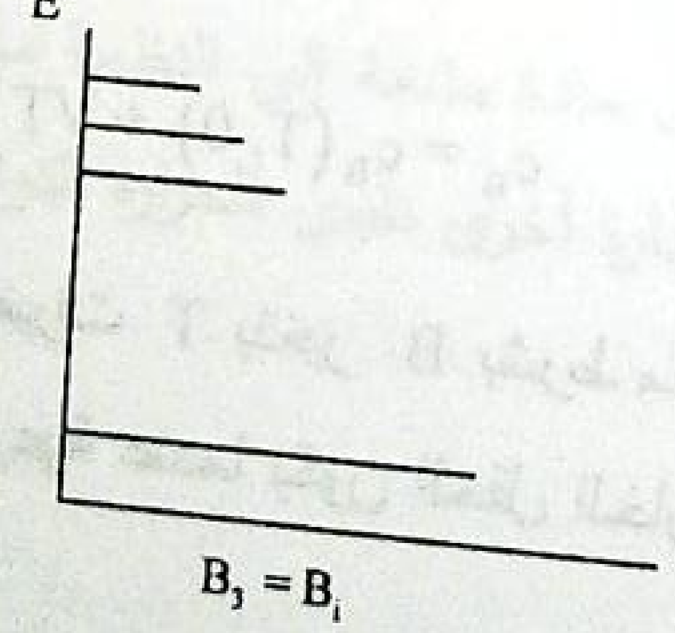
و $T_f < T_i$ عندما يكون $B_f < B_i$.

لابد من الملاحظة هنا أن هذه العلاقة لا تعني أن $T_f = 0$ في النقطة c الواقعة على منحني S من أجل $B = 0$ $(B_f = 0)$، فهي علاقة تقريبية حصلنا عليها بإهمال تفاعل سبينات الذرات فيما بينها. وهو أمر غير مقبول عندما تنخفض درجة الحرارة انخفاضاً كبيراً وتتوازى السبينات شيئاً فشيئاً فيما بينها بحيث توجد كل ذرة في حقل مغنطيسي وسطي B_m ناتج عن السبينات المجاورة $\frac{g\mu_0 B_m}{T}$. لا يختلف B_m عن الصفر إلا في درجات الحرارة المرتفعة حيث يزول طابع المغنطيسية الحديدية، وبالتالي فإن $\frac{T_f}{T_i} = \frac{B_m}{B_i}$ و $T_f \neq 0$ عندما ينعدم الحقل المغنطيسي الخارجي B_f.

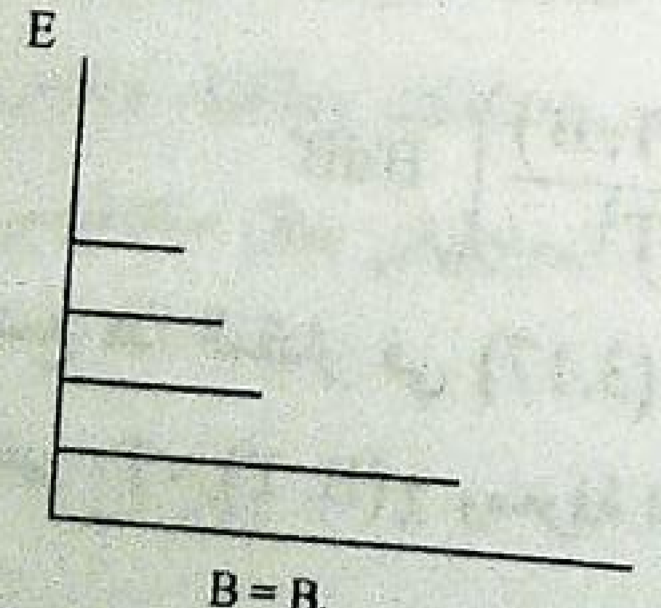
لا بأس قبل البدء بالدراسة الترموديناميكية ترجمة هذا المخطط الجهري a، b، c أعلاه على المستوى المجهري بأخذ سبين ذرات المادة مساوياً لـ $\frac{3}{2}$. عدد الحالات المتاحة، عدد مستويات الطاقة هو 4 : $+\frac{3}{2}, \cdots -\frac{3}{2}$. تتوزع الذرات بالتساوي على هذه المستويات في الحالة البدائية، حالة التوازن ونعين نسبة عدد الذرات في مستوى ما بطول أفقي، الشكل.17a. تتغير هذه الأعداد عندما نغير شدة الحقل المغنطيسي بشكل متناسب مع $e^{-\frac{\langle M \rangle B}{T}}$، تقابل الحالة المتاحة ذات الطاقة الأكبر أصغر عدد من الذرات، الشكل.17b، لا تتغير هذه الأعداد في التحول الكظوم الذي يعيدنا إلى $B_i = 0$ لأن S بقيت ثابتة ولكن مستويات الطاقة عادت إلى ما كانت عليه في الحالة a، الشكل.17c.



الشكل.17a



الشكل.17b



الشكل.17c

الكظومة (تغير شبه عكوس) ويتمثل التحول بالانتقال من b إلى c: $S(T_f, B_f) = S(T_i, B_i)$؛ وبما أن المقدار الترموديناميكي الأساسي هو الطاقة مقسومة على درجة الحرارة $\frac{\langle M \rangle B}{T}$، عندما نهمل تفاعل العزوم المغنطيسية لذرات المادة فيما بينها فإن S تابعة في واقع الأمر لـ $\frac{B}{T}$، ولدينا

$$S\left(\frac{B_i}{T_i}\right) = S\left(\frac{B_f}{T_f}\right) \quad (3.15)$$

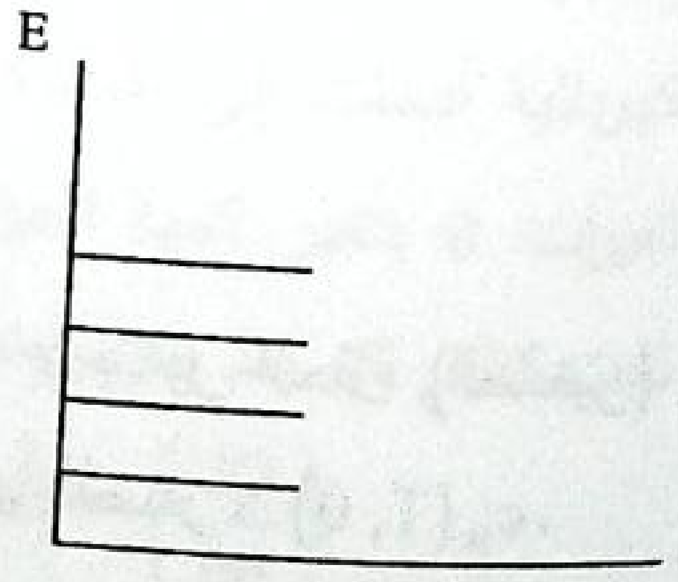
ومنه

$$\frac{B_i}{T_i} = \frac{B_f}{T_f} \quad (3.15)'$$

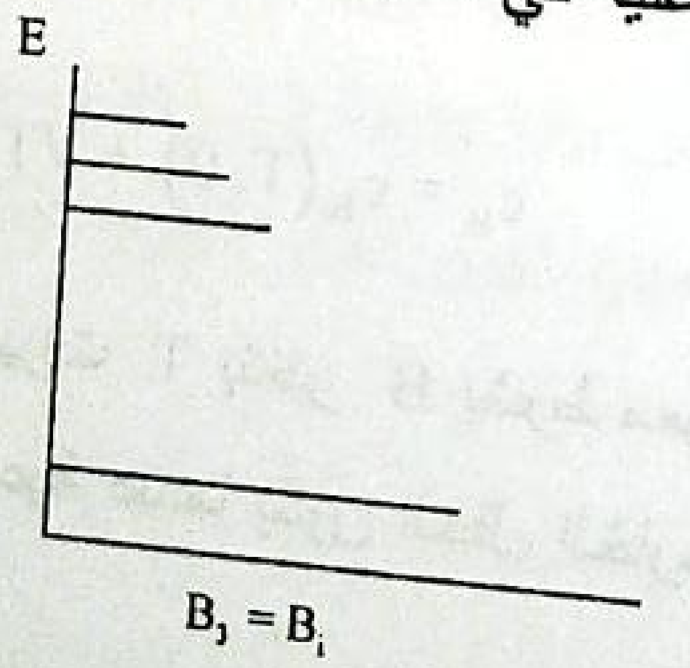
و $T_f < T_i$ عندما يكون $B_f < B_i$.

لابد من الملاحظة هنا أن هذه العلاقة لا تعني أن $T_f = 0$ في النقطة c الواقعة على منحني S من أجل $B = 0$ $(B_f = 0)$، فهي علاقة تقريبية حصلنا عليها بإهمال تفاعل سبينات الذرات فيما بينها. وهو أمر غير مقبول عندما تنخفض درجة الحرارة انخفاضاً كبيراً وتتوازى السبينات شيئاً فشيئاً فيما بينها بحيث توجد كل ذرة في حقل مغنطيسي وسطي B_m ناتج عن السبينات المجاورة $\frac{g\mu_0 B_m}{T}$. لا يختلف B_m عن الصفر إلا في درجات الحرارة المرتفعة حيث يزول طابع المغنطيسية الحديدية، وبالتالي فإن $\frac{T_f}{T_i} = \frac{B_m}{B_i}$ و $T_f \neq 0$ عندما ينعدم الحقل المغنطيسي الخارجي B_f.

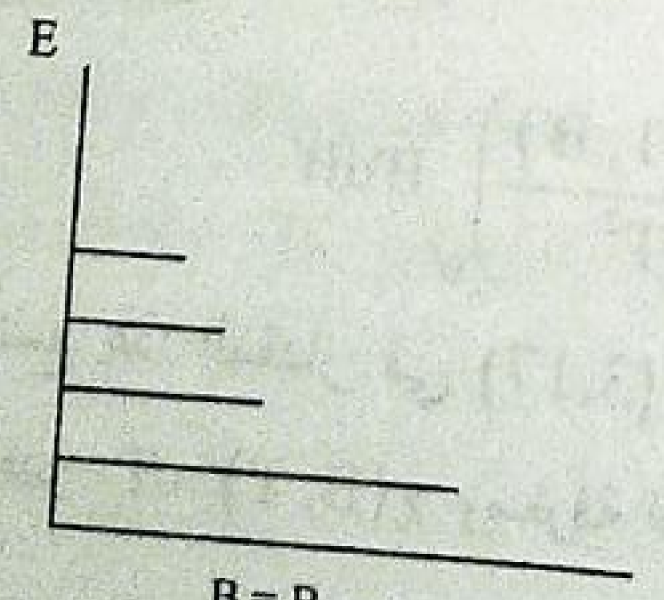
لا بأس قبل البدء بالدراسة الترموديناميكية ترجمة هذا المخطط الجهري a، b، c أعلاه على المستوى المجهري بأخذ سبين ذرات المادة مساوياً لـ $\frac{3}{2}$. عدد الحالات المتاحة، عدد مستويات الطاقة هو 4: $+\frac{3}{2}, \frac{3}{2}-\dots$. تتوزع الذرات بالتساوي على هذه المستويات في الحالة البدائية، حالة التوازن ونعين نسبة عدد الذرات في مستوى ما بطول أفقي، الشكل.17a. تتغير هذه الأعداد عندما نغير شدة الحقل المغنطيسي بشكل متناسب مع $e^{\frac{\langle M \rangle B}{T}}$، تقابل الحالة المتاحة ذات الطاقة الأكبر أصغر عدد من الذرات، الشكل.17b، لا تتغير هذه الأعداد في التحول الكظوم الذي يعيدنا إلى $B_i = 0$ لأن S بقيت ثابتة ولكن مستويات الطاقة عادت إلى ما كانت عليه في الحالة a، الشكل.17c.



الشكل.17a



الشكل.17b



الشكل.17c

لنحسب الآن تغيرات درجة الحرارة بتغير B ، لدينا

$$dE(S, V, B) = TdS - PdV - \langle M\rangle dB$$

$PdV = 0$ ، ولدينا نظراً لكون dE تفاضلاً تاماً

$$\left(\frac{\partial T}{\partial B}\right)_S = \left(\frac{-\partial\langle M\rangle}{\partial S}\right)_B = -\left(\frac{\partial\langle M\rangle}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial S}\right)_B \qquad (3.16)$$

نكتب $\langle M\rangle$ بدليل القابلية المغنطيسية $M = V\chi B$ و $\frac{\partial\langle M\rangle}{\partial T} = BV\frac{\partial\chi}{\partial T}$ ومن جهة أخرى فإن الحرارة النوعية في حقل ثابت هي

$$c_B(T, B) = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_B$$

بحيث

$$\left(\frac{\partial T}{\partial B}\right)_S = -\frac{VTB}{c_B}\left(\frac{\partial\chi}{\partial T}\right)_B \qquad (3.17)$$

يبقى علينا لمعرفة تغير T بتغير B حساب الحرارة النوعية في شروط حساب القابلية المغنطيسية، $B \to 0$ ؛ لدينا من جهة،

$$\left(\frac{\partial c_B}{\partial B}\right)_T = \frac{\partial}{\partial B}\left(T\frac{\partial S}{\partial T}\right)_B = T\frac{\partial^2 S}{\partial B\partial T} = T\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{\partial S}{\partial B}\right)_T \qquad (3.18)$$

ومن جهة أخرى فإن كون طاقة هيلمهولتز الحرة تفاضلاً تاماً، $F(T, V, B)$

$$dF = -SdT - \langle M\rangle dB$$

يرينا أن

$$\left(\frac{\partial S}{\partial B}\right)_T = \left(\frac{\partial\langle M\rangle}{\partial T}\right)_B$$

ومنه بالتبديل في (3.18)

$$\left(\frac{\partial c_B}{\partial B}\right)_T = T\frac{\partial^2\langle M\rangle}{\partial T^2} = TVB\left(\frac{\partial^2\chi}{\partial T^2}\right)_B \qquad (3.18)'$$

وبالمكاملة

$$c_B = c_B(T, 0) + VT\int_0^B\left(\frac{\partial^2\chi(T, B')}{\partial T^2}\right)_{B'} B'dB'$$

نضع هذا المقدار في (3.17) فتتعين تغيرات T بتغير B بشرط معرفة تغير χ بتغير الحقل (الصغير) وتغير T ، $\chi(B, T)$ ومعرفة الحرارة النوعية عندما يكون الحقل الخارجي مساوياً للصفر، $c_B(T, 0)$.

4.3- قياس درجات الحرارة في جوار الصفر المطلق

يكتسي قياس درجات الحرارة في جوار الصفر المطلق، لنقل أقل من $1°K$، أهمية خاصة من الناحيتين النظرية والتجريبية. فالترموديناميك (التقليدي والكمومي) قائم على مفهوم درجة الحرارة المطلقة المبتدئة بالصفر، كما أن عدد الظواهر الفيزيائية المختلفة التي تقع في حدود هذه الدرجة، في المجال $\left[10^{-3}°K, 1°K\right]$ لا يقل عن عدد الظواهر الواقعة في المجال $\left[1°K, 10^{3}°K\right]$. لكن بعض الصعوبات تعتري هذا القياس، فالغاز الكامل المستعمل في ميزان الحرارة يتكثف في هذا الجوار ليصبح مائعاً أو جامداً وتتوقف صلاحية بعض العلاقات في هذا الجوار، تناسب القابلية المغنطيسية χ مع T^{-1} على سبيل المثال.

يقوم مبدأ قياس درجة الحرارة في هذا المجال على إيجاد وسيط ترمومتري θ يغير كمية الحرارة $Q(\theta) = Q$ والأنتروبية $S(\theta) = S$ وقياس درجة الحرارة بالعلاقة بين تغيرات هذين المقدارين ودرجة الحرارة :

$$T = \frac{dQ}{dS} = \frac{\frac{dQ}{d\theta}}{\frac{dS}{d\theta}} \qquad (3.19)$$

إن الوسيط الترمومتري تعريفاً هو المقدار الوحيد الذي يتغير بتغير درجة الحرارة مع بقاء كل الوسطاء الخارجية ثابتة. ليكن B، الحقل المغنيطسي، الوسيط الخارجي الوحيد. تعني العلاقة (3.19) أننا نقيس تغيرات Q و S في حقل مغنطيسي ثابت $B = B_0$. نكتب للتحديد

$$T = \frac{\left(\frac{dQ}{d\theta}\right)_{B=B_0}}{\left(\frac{dS}{d\theta}\right)_{B=B_0}} \qquad (3.19)'$$

ليكن ميزان الحرارة مادة صلبة مسايرة التمغنط في ضغط ثابت، ولتكن القابلية المغنطيسية الوسيط الترمومتري الذي تتعين قيمته بقياس تحريضية ملف محيط بالمادة. نرفع شدة الحقل B إلى أن تصل θ (القابلية المغنطيسية) إلى مقدار معين و $B = B_0$. نبدأ بعد ذلك بتسخين المادة بطريقة ما، بمقاومة كهربائية أدخلت إلى النظمة أو بإدخال مادة مشعة إلى النظمة مع معرفة نسبة التفكك وطاقته. ونقيس تغيرات θ بتغير كمية الحرارة، أو بعبارة أخرى نقيس الحرارة النوعية لميزان الحرارة في حقل مغنطيسي ثابت كتابع للوسيط الترمومتري θ

$$C_0(\theta) = \left(\frac{dQ}{d\theta}\right)_0 \qquad (3.20)$$

0، تشير إلى الحقل المغنطيسي الثابت $B = B_0$.

من أجل S لنفرض أننا نعرف قيمة. $\theta = \theta(T)$ لأن θ تابعة لـ T و B

إن الأنتروبية S التابعة لـ T و B تابعة لـ θ لأن $\theta=\theta(T)$. مثلاً: وشدة الحقل B $T > 1°K$ من أجل $\theta_i(T) \sim T^{-1}$

"درجة الحرارة" θ_i، نعرف القابلية المغنطيسية B_0 إلى أن تصل إلى بشكل كظوم شدة الحقل حرارياً وننقص

$S(\theta_i, B)$ معينة. نعزل ميزان الحرارة θ، أعلاه ولتكن بالطريقة المذكورة المقابلة درجة الحرارة

$B_0 < B$) وإزالة التمغنط إزالة كظومة). نقيس

لدينا

$$S(\theta, B_0) = S(\theta_i, B) \tag{3.21}$$

إن θ_i تابعة لـ B ولذا فإن اشتقاق الطرفين يعطينا

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \theta}\right) = \frac{\partial S(\theta_i, B)}{\partial B}\frac{\partial B}{\partial \theta} \tag{3.22}$$

من $\left(\frac{\partial S}{\partial \theta}\right)_0$ والمشتق وبالتالي تحديد مماسه

من الممكن تجريبياً رسم منحني تغيرات $S(\theta, B_0)$ بدليل θ وبالتالي تعيين

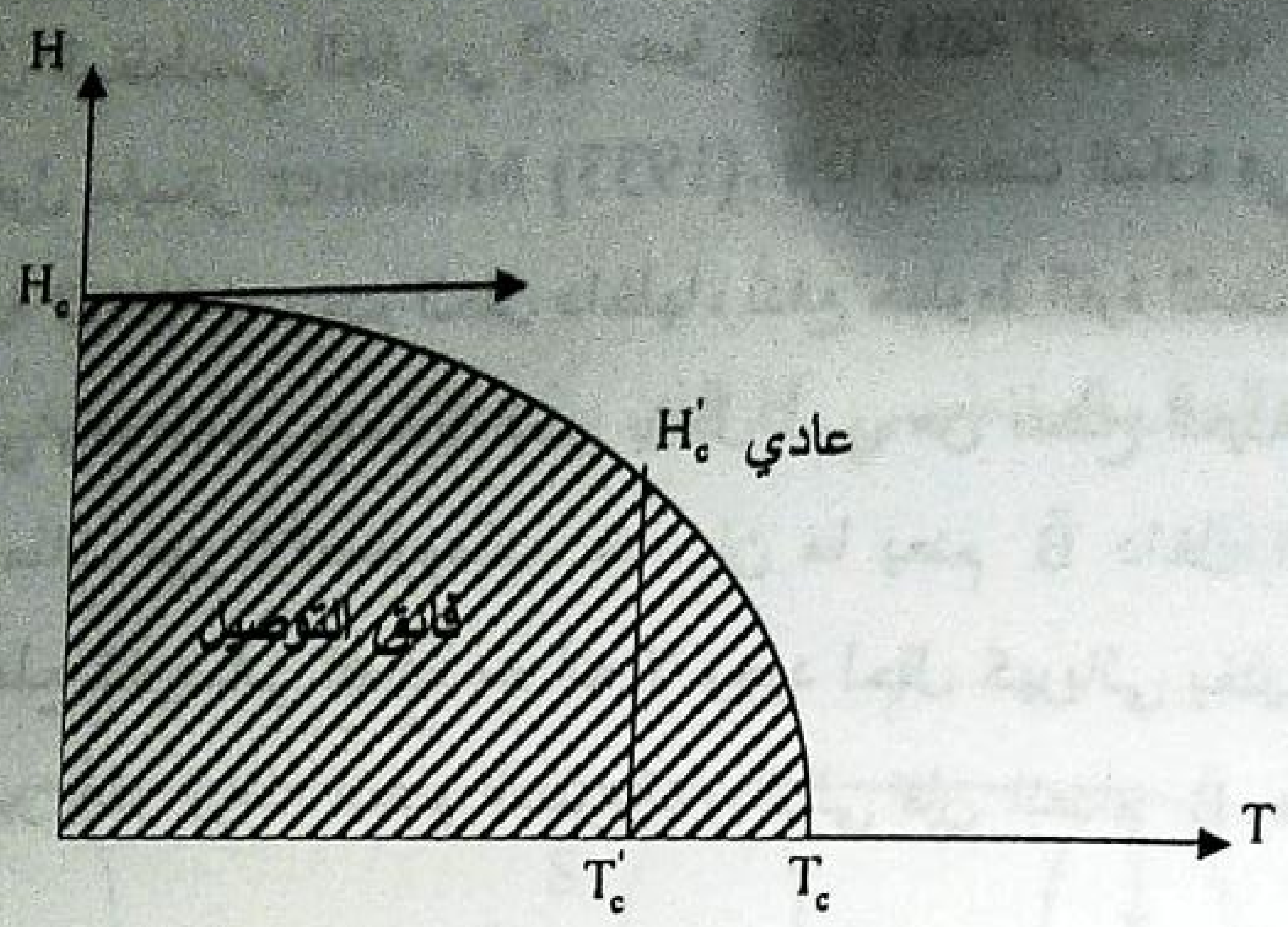
أجل θ كيفما اتفق، $\theta = \theta_f$. ومن الممكن كذلك رسم منحني تغيرات $C_0(\theta)$ بدليل θ وبالتالي تعيين

$C_0(\theta_f)$. نضع هاتين القيمتين في '(3.19) فنحصل على درجة الحرارة T.

4. فائقية التوصيل

1.4- النتائج التجريبية

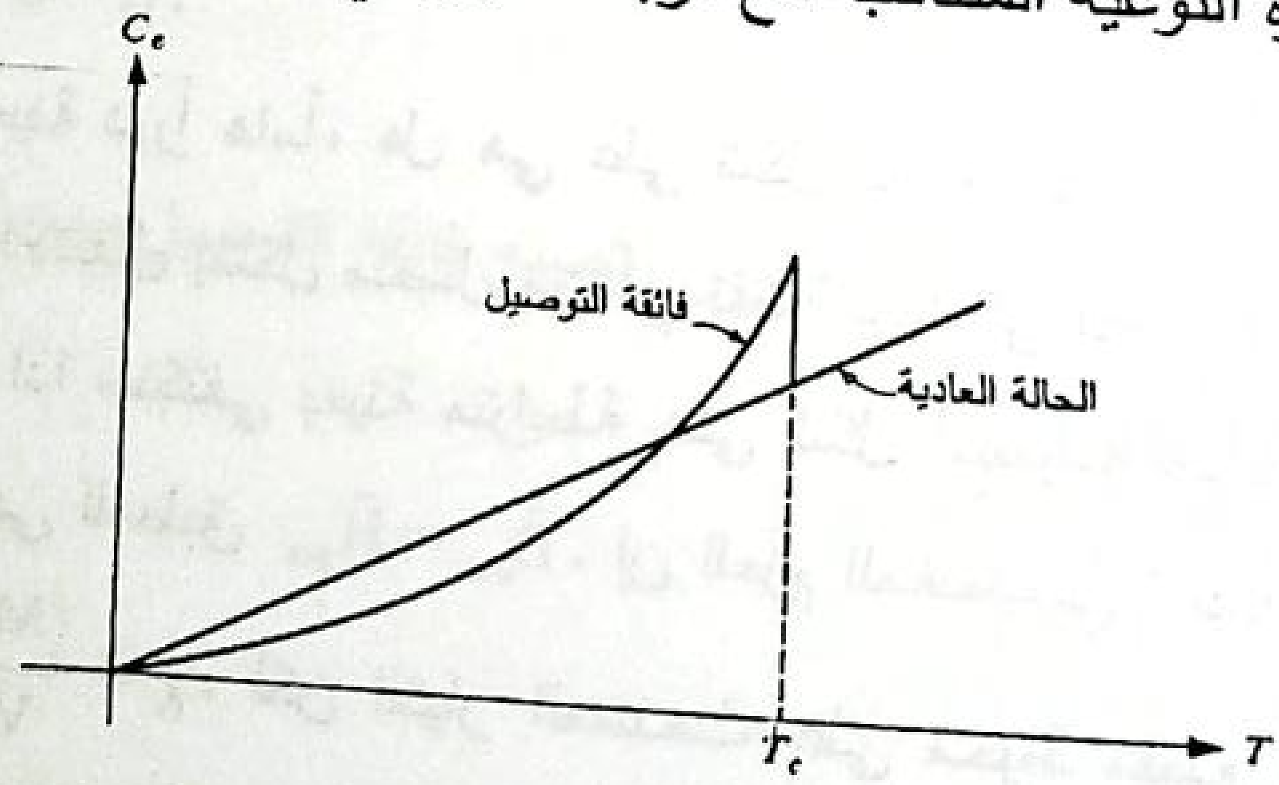
فائقية التوصيل معروفة منذ أوائل القرن الماضي، اكتشفها كاميرلينغ أونس Kammerling Onnes (1911) على الزئبق الذي يصبح فائق التوصيل في درجة الحرارة 4,2°K. تنعدم المقاومة الكهربائية وتنعدم معها الحاجة إلى تغذية الدارة التي أطلق فيها التيار الكهربائي : لا توقف إزالة البطارية حركة الجسيمات المشحونة (الإلكترونات) ولا تبطئها؛ وأظهرت التجارب أنه يمكن للتيار أن يستمر لسنوات عديدة. تتوقف درجة الحرارة الحرجة على شدة الحقل المغنطيسي المطبق على عينة المعدن؛ يظهر المخطط، الشكل.18، منحني عبور الطور في المستوى (T, H) بين الحالة العادية – المقاومة الكهربائية $\rho \neq 0$ – والحالة فائقة التوصيل – $\rho = 0$ – يستمر الطور فائق التوصيل مادامت درجة الحرارة أصغر من درجة الحرارة الحرجة T_c وشدة الحقل المغنطيسي أصغر من الشدة المطلوبة H_c لإعادة العينة إلى الحالة العادية. تميز H_c المادة فائقة التوصيل بل إنها أهم مميزة لها.



الشكل.18

تتوقف درجة الحرارة الحرجة على نوع العينة، فهي $0,56°K$ في حال الكادميوم لتصل إلى حوالي $21°K$ في حال خليط $Nb_{12}Al_3Ge$. وقد اكتشف نوع جديد من الخلائط الخزفية فائقة التوصيل في درجات حرارة "مرتفعة" تفوق $90°K$ (Bednorz, Müller (1986)) أي في درجة حرارة تفوق درجة غليان الأزوت السائل بـ $13°K$، الأمر الذي يسهل التجارب والتطبيقات التكنولوجية للظاهرة.

رأينا أن الحرارة النوعية للجسم الصلب الناتجة عن الحركة الاهتزازية للذرات متناسبة مع T^3، ولهذا فإن الحرارة النوعية التي تزيد عن هذا التناسب هي بالضرورة حرارة الإلكترون النوعية وهي متناسبة مع درجة الحرارة T في الحالة العادية ($(3.14)'$.2). يظهر، الشكل.19، الفرق بين الحرارة النوعية للإلكترونات في حالة فائقية التوصيل والحرارة النوعية المتناسبة مع درجة الحرارة في الحالة العادية.



الشكل.19

يعطي تكامل منحني الحرارة النوعية الإلكترونية طاقة العينة، ويبين الشكل أن طاقة العينة في حالة فائقية التوصيل أصغر من طاقة الحالة العادية (المتناسبة مع T_c^2). ليس انعدام المقاومة الكهربائية للمادة بالخاصة الأساسية لفائقية التوصيل وإنما خواصها المغنطيسية التي يطرأ عليها تغير جذري عند عبور

في داخل المادة[5] $\vec{B} = 0$ فائقة التوصيل، إلى عمق المادة الطور : لا يدخل الحقل المغنطيسي الخارجي إلى عمق المادة فائقة التوصيل، وهو ما يعرف باسم مفعول مايسنر Meissner (1933). فإذا وضعت المادة في حقل مغنطيسي وبردت إلى درجة الحرارة الحرجة المقابلة له ينعدم الحقل داخلها، تُدفع خطوط القوة المغنطيسية إلى خارج المادة. لا ينعدم الحقل تماماً في واقع الأمر وإنما يتناقص بشكل أسي من سطح العينة إلى داخلها كما سنرى لينعدم على بعد بضع مئات من الأنغسترومات عنه. إن ما يعدم $\vec{B}$ داخل العينة هو وجود تيارات كهربائية مستقرة في المقطع العرضاني للمادة مع أنه لا وجود لحقل كهربائي يغذيها. فهو وجود لا يرافقه أي تبدد للطاقة، أو بتعبير آخر يرافقه انعدام المقاومة؛ وبالتالي فإن انعدام $\vec{B}$ هو المسؤول عن فائقية التوصيل.

2.4– المعالجة الترموديناميكية

لنذكر في البداية أننا أطلقنا اسم الحقل المغنطيسي على $\vec{B}$ وليس على الحقل $\vec{H}$ المعرف داخل المادة بالعلاقة

$$\vec{B} = \vec{H} + \mu_0\vec{M} \equiv \mu\vec{H} \qquad (4.1)$$

حيث $\vec{M}$ عزم المادة المغنطيسي و μ نفوذيتها؛ حسبنا $\vec{M}$ في (1.§3.1) وكتبناه في حالة السبين $\frac{1}{2}$ على الشكل $\vec{M} = N\mu_B \mathrm{th}\frac{\mu_B \vec{B}}{T}$ حيث μ_B مغناتون بور، $(\mu_0\varepsilon_0 c^2 = 1)$. يعني عدم توغل $\vec{B}$ داخل العينة فائقة التوصيل أن $\mu = 0$.

يلعب الشكل الهندسي للعينة دوراً هاماً، هل هي على شكل كرة أم على شكل حلقة ؟ هل هي مترابطة Connexe بحيث يمكن الانتقال بشكل متصل من أي نقطة فيها إلى أخرى ؟ الخ. وهي أمور جد معقدة تخرج عن إطار دراستنا. لذا سنكتفي بعينة مترابطة على شكل أسطوانة طويلة طولها ℓ، مقطعها S، مولدها مواز للحقل الخارجي المطبق $\vec{B}_{ext} = \vec{H}_{ext}$. إن العزم المغنطيسي للعينة $\langle M \rangle$ يساوي الصفر في الحالة العادية $\chi = \frac{\langle M \rangle}{V} \simeq 10^{-5}$. لكن التيار المستحث على محيط مقطع الأسطوانة العرضاني هو الذي يولد العزم المغنطيسي الذي يجعل $\vec{B}$ في (4.1) مساوياً للصفر.

لدينا في الجملة السغثية، حيث تأخذ (4.1) الشكل

$$\vec{B} = \vec{H} + 4\pi\frac{\vec{M}}{V} \qquad (4.1)'$$

---

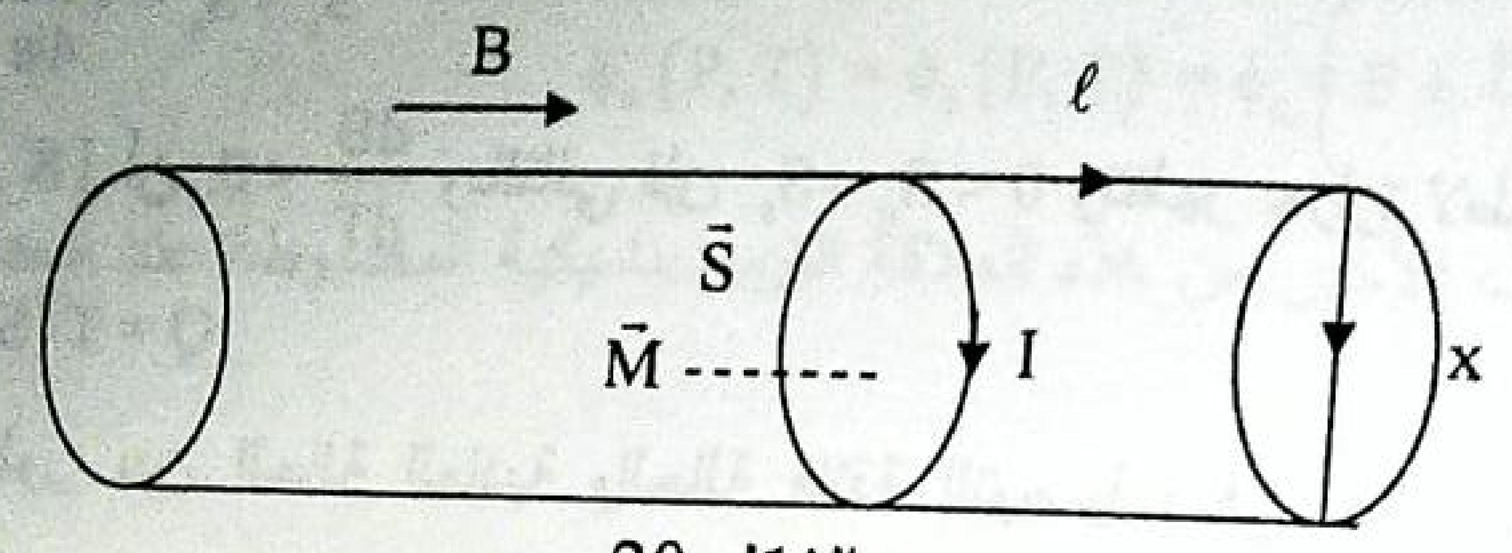
[5] هذا هو حال بعض المعادن والخلائط المسماة فائقة التوصيل النقية – وهو الحال الأبسط الذي سنقتصر عليه هنا. إلا أنه من الممكن في حالات أخرى ألا ينعدم الحقل المغنطمي في داخل المادة مع بقائها فائقة التوصيل. وهكذا فانعدام $\vec{B}$ شرط كاف ولكنه ليس ضرورياً لانعدام المقاومة الكهربائية. يطلق على المواد فائقة التوصيل التي لا يُطرد الحقل المغنطيسي منها تماماً، مواد فائقية التوصيل من النوع II (type II).

و

$$\vec{M} = \frac{1}{c} I\vec{S}$$

لدينا حسب قانون آمبير الحقل المغنطيسي H_I الذي يولده التيار في اتجاه معاكس لـ $\vec{B}$، الشكل.20 :

$$\vec{H}_I = -\frac{4\pi}{c}\frac{I}{\ell}$$



الشكل.20

وهكذا فإن

$$0 = \vec{B} = \vec{H} + \vec{H}_I$$

و

$$\vec{M} = \frac{I}{c}\frac{c\ell\vec{H}_I S}{4\pi} = -\frac{V\vec{H}}{4\pi} \qquad (4.2)$$

كما تتطلب '(4.1).

إن العمل الذي تبذله العينة عندما يتغير الحقل المغنطيسي فيها بالمقدار $d\vec{B}$ هو

$$\vec{M} \cdot d\vec{B} = -\frac{V\vec{H}}{4\pi}\mu d\vec{H} \qquad (4.3)$$

والعمل الكلي الذي تبذله لطرد كل الحقل الغنطيسي وتصبح فائقة التوصيل، من أجل $H = H_c$، هو

$$\int_{H_c}^{0} -\frac{V\mu H dH}{4\pi} = \frac{V\mu H_c^2}{8\pi} \qquad (4.4)$$

ملاحظة :

عندما نكتب التغير المتناهي في الصغر لطاقة العينة

$$dE = TdS - PdV = TdS - \langle\vec{M}\rangle d\vec{B} \qquad (4.5)$$

حيث الحجم ثابت بتقريب جيد جداً، نرى أن $\langle\vec{M}\rangle d\vec{B}$ تلعب دور PdV وبالتالي فإن الطاقة (4.4) تلعب دور PV عندما ننتقل من الطاقة الحرة F إلى الكمون الترموديناميكي ϕ.

نكتب كالمعتاد لحساب الحرارة اللاطية $F_n = F_s$ في نقطة العبور، حيث n و s تشيران إلى الحالة العادية وفائقة التوصيل،

$$F_n = F_s = (E - TS)_{n,s}$$

$$dF = dE - TdS - SdT = -SdT - \langle \vec{M} \rangle d\vec{B}$$

وبوضع $dF_s = dF_n$ نرى أن

$$(S_n - S_s)dT = -(\langle M_n \rangle - \langle M_s \rangle)dB$$

قلنا أن $M_n = 0$، نستبدل M_s بقيمتها في (4.2) لنجد

$$S_n - S_s = -\frac{V}{4\pi} H \frac{dB}{dT} \qquad (4.6)$$

يبين الشكل التجريبي 18 أن $\frac{dB}{dT} < 0$ وبالتالي فإن $0 < S_n - S_s$ وتظهر حرارة لاطية عند عبور الطور

$$Q = T(S_n - S_s) \qquad (4.7)$$

وهكذا فإن عبور الطور بين الحالة العادية والحالة فائقة التوصيل، في حال وجود حقل مغنطيسي خارجي، هو عبور طور من النوع الأول حسب تصنيفنا في (II.4.§1.6). كما $\frac{dB}{dT} = 0$ و $S_n - S_s \underset{T \to 0}{\to} 0$، عندئذ تختفي هذه الحرارة اللاطية عندما تسعى درجة الحرارة نحو الصفر، كما تبين التجربة.

لنكتب طاقة هيلمهولتز الحرة بوجود أو انعدام الحقل المغنطيسي. إن $F_n(V,T) = F_{n_0}(V,T)$ في الحالة العادية، حيث 0 تشير إلى انعدام الحقل، لأن هذه الطاقة لا تتأثر بوجود الحقل المغنطيسي، أما في الحالة فائقة التوصيل

$$F_S(V,T) = F_{S_0}(V,T) + \frac{\mu H^2}{8\pi} V \qquad (4.8)$$

تتيح لنا هذه العلاقة حساب الضغط بوجود الحقل المغنطيسي، $P = -\frac{\partial F}{\partial V}$

$$P = P_0(V,T) - \frac{\mu H^2}{8\pi} \qquad (4.9)$$

فنرى أن الحجم V بوجود الحقل $V(P,T)$ يساوي الحجم بغيابه بشرط أن يكون الضغط في هذه الحالة، P_0 مساوياً لـ $P + \frac{\mu H^2}{8\pi}$. تسمح لنا العلاقتان السابقتان بكتابة الكمون الترموديناميكي ϕ بوجود الحقل على الشكل

$$\phi_S \equiv F_S + PV = F_{S_0} + P_0 V$$

وبتعبير آخر

$$\phi_S(P,T) = \phi_{S_0}\left(P + \frac{\mu H^2}{8\pi}, T\right) \qquad (4.10)$$

حيث ϕ_{s_0} هو الكمون الترموديناميكي في غياب الحقل المغنطيسي. تحدد هذه العلاقة عند اشتقاقها بالنسبة لـ T و P علاقتين مماثلتين للأنتروبية والحجم

$$S_s(P,T) = S_{s_0}\left(P + \frac{\mu H^2}{8\pi}, T\right) \qquad (4.11)$$

$$V_s(P,T) = V_{s_0}\left(P + \frac{\mu H^2}{8\pi}, T\right) \tag{4.12}$$

يمكننا الآن أن نعين الشرط الذي يحققه الحقل المغنطيسي الحرج H_c للانتقال من الحالة s إلى الحالة n (في ضغط ودرجة حرارة معينين)؛ $\phi_n < \phi_S$ لكي يتم الانتقال ولكن $\phi_n = \phi_S$ عند العبور، لدينا من (4.10)

$$\phi_n(P,T) = \phi_S(P,T) = \phi_{s_0}\left(P + \frac{\mu H_c^2}{8\pi}, T\right)$$

نتوقف في نشر الطرف الأخير من هذه العلاقة الترموديناميكية المضبوطة عند الحد الأول ونكتب، نظراً لأن $V = \frac{\partial \phi}{\partial P}$ ،

$$\phi_n(P,T) = \phi_s(P,T) = \phi_{s_0}(P,T) + \frac{\mu H_c^2}{8\pi} V_{s_0}(P,T) \tag{4.13}$$

V_{s_0} هو حجم الأسطوانة في غياب الحقل المغنطيسي.

تتوقف درجة الحرارة الحرجة $T_c(P)$ على ضغط الأسطوانة في غياب الحقل المغنطيسي الخارجي وينعدم الحقل المغنطيسي في داخل المادة بشكل متصل. يتعلق الأمر هنا بعبور طور من النوع الثاني كما تبين التجربة ويتناسب تغير الكمون في جوار نقطة العبور مع $(T - T_c)^2$ كما رأينا في الفقرة المذكورة أعلاه في دروس الترموديناميك. تلعب المقاومة الكهربائية ρ دور وسيط الانتظام في هذا العبور.

3.4- مفعول مايسنر وقفزة الطاقة

يبين المخطط 18 أمرين، أولهما أنه عندما نطبق حقلاً مغنطيسياً ضعيفاً على معدن فائق التوصيل (درجة حرارته أقل من T_c) فإن الحقل لن يتوغل فيه ويبقى فائق التوصيل إلى أن يبلغ الحقل شدة معينة. ينتج تغير تدفق الحقل حقلاً كهربائياً وتياراً يعترض التدفق (قانون لنز) ويطرد الحقل، وثانيهما هو مفعول مايسنر : عندما نخضع المعدن العادي إلى حقل مغنطيسي ونخفض درجة الحرارة إلى أقل من درجة الحرارة الحرجة فإن المعدن وقد أصبح فائق التوصيل يطرح الحقل المغنطيسي.

عالج الأخوان لندن London مفعول مايسنر كما يلي : لتكن ρ كثافة الإلكترونات الموجودة في حقل كهربائي E ، m كتلة الإلكترون و e شحنته السالبة. إن كثافة التيار هي

$$\vec{J} = \rho e \dot{\vec{r}}$$

ومعادلة الحركة هي

$$m\ddot{\vec{r}} = e\vec{E}$$

إن منشأ الحقل الكهربائي هنا هو وجود الكمون المتجهي المغنطيسي $\vec{A}$ ، ولدينا (في الوحدات السغثية)

$$\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

ومنه

$$\frac{d\vec{J}}{dt} = -\frac{\rho e^2}{mc}\frac{\partial A}{\partial t}$$

نرمز للثابتة $\frac{\rho e^2}{mc}$ بـ Λ ونكامل هذه العلاقة لنحصل على

$$\vec{J} = -\Lambda\left(\vec{A} - \vec{A}_c\right)$$

حيث $\vec{A}_c$ كمون متجهي ثابت مع الزمن ولكنه مختلف من نقطة إلى أخرى في الفضاء مبدئياً. يحدده مفعول مايسنر بحيث ينعدم الحقل المغنطيسي داخل الأسطوانة فائقة التوصيل. اقترح لندن إعطاءه القيمة صفر، إن $\vec{J}_n = 0$ في الحالة العادية وبالتالي فإن $\vec{A}_n = 0$. نحصل على $\vec{A}_c = 0$ باختيار معايرة لـ $\vec{A}$ تعرف باسم المعايرة العرضانية. لدينا إذاً

$$\vec{J} = -\Lambda\vec{A} \qquad (4.14)$$

ومعادلة ماكسويل في الوحدات التي اعتمدناها

$$\nabla^2\vec{A} = -\frac{4\pi}{c}\vec{J} = \frac{4\pi}{c}\Lambda\vec{A}$$

إن تغيرات A هي ببعد واحد x، ونتيجة التكامل هي

$$A \sim e^{\pm\sqrt{\frac{4\pi\Lambda}{c}}\,x} \qquad (4.15)$$

نختار إشارة – بحيث يتناقص A مع تعمق التوغل في الأسطوانة؛ يصل هذا العمق إلى $700\,\mathring{A}$ $\left(\frac{c}{4\pi\Lambda}\right)$.

توحي هذه المحاكمة بمصدر التوغل Λ وبمعمقه، ولكنها لا تتفق مع الواقع لأن الإلكترونات ليست حرة في المعدن. أجريت تحسينات عليها بأخذ كمون متجهي $\vec{A}'$، متوسط الكمون المتجهي A على مسافات معينة، بأخذ الكمون التالي – في بعد واحد

$$A'(x) = c\int A(y)\,e^{\frac{-|x-y|}{\xi}}\,dy$$

حيث c ثابتة تنظيم، ξ أصغر بكثير من عمق التوغل في حالة فائق التوصيل من النوع II ولكنها كبيرة في حالة فائق التوصيل النقي. وأجريت تحسينات أخرى، من قبل لندن بالذات، بأخذ كثافة التيار الكهربائي الكمومي (IV.(2.(1.16)))

$$\vec{J} = \frac{i\hbar e}{2m}\left(\psi\vec{\nabla}\bar{\psi} - \bar{\psi}\vec{\nabla}\psi\right)$$

الذي يصبح بوجود حقل مغنطيسي، الذي يستبدل بالمؤثر $\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$ المؤثر $\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c}$ (في الوحدات التي نستعملها هنا) (IV.(4.§2.4))

$$\bar{J} = \frac{i\hbar e}{2m}\left(\psi\overline{\left(\vec{\nabla} - \frac{i}{\hbar}\frac{e\vec{A}}{c}\right)\bar{\psi}} - \bar{\psi}\left(\vec{\nabla} - \frac{i}{\hbar}\frac{e\vec{A}}{c}\right)\psi\right)$$

$$= \frac{i\hbar e}{2m}\left(\psi\vec{\nabla}\bar{\psi} - \bar{\psi}\vec{\nabla}\psi\right) - \frac{e^2\vec{A}}{mc}\bar{\psi}\psi \qquad (4.16)$$

حيث استبدلنا بـ $\vec{\nabla}$ المشتق مساير التغيير $\vec{\nabla} - \frac{i}{\hbar}\frac{e\vec{A}}{c}$.

لا يمكن لهذا التيار أن يوجد إلا بوجود $\vec{A}$، أي أن متجهة حالة الإلكترون في حال انعدام هذا الكمون ولنرمز لها بـ ψ_0 تحقق

$$\bar{J} = \frac{i\hbar e}{2m}\left(\psi_0\vec{\nabla}\bar{\psi}_0 - \bar{\psi}_0\vec{\nabla}\psi_0\right) = 0$$

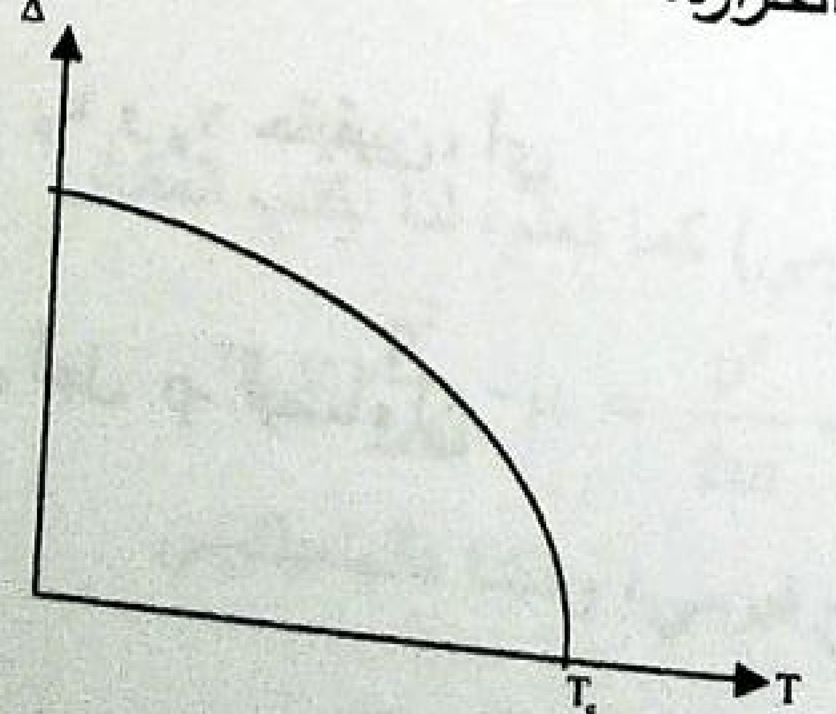
ننظر إلى وجود $\vec{A}$ كاضطراب يحول متجهة الحالة ψ_0 إلى متجهة حالة قريبة منها $\psi = \psi_0$ بحيث تتحقق العلاقة

$$\bar{J} = -\frac{e^2\vec{A}}{mc}\bar{\psi}\psi = -\frac{e^2\rho}{mc}\vec{A} \qquad (4.17)$$

حيث $\rho = \bar{\psi}\psi$ هي كثافة الإلكترونات في واحدة الحجوم. نقارن هذه النتيجة مع (4.14) لنجد من جديد $\Lambda = \frac{e^2\rho}{mc}$. هذا يعني أن الاضطراب H' لم يغير متجهة الحالة $\langle\psi_0|$ بمقدار كاف : نكتب التقريب الأول لـ $\langle\psi_0|$، $\langle\psi^{(1)}|$، حسب (((IV.(4.(1.12)) على الشكل

$$\psi^{(1)} = \sum_{n\neq 0}\frac{H'_{n_0}}{E_n - E_0}|u_n\rangle$$

حيث $\langle u_n|$ متجهات خاصة لـ H_0 تقابلها الطاقة E_n و E_0 طاقة القاع $H_0|u_0\rangle = E_0|u_0\rangle$ و $\langle\psi^{(1)}|$ صغيرة جداً إذا كان الفرق بين أول مستوى محرض E و E_0 كبيراً و $\langle\psi_0| = |\psi\rangle$. لابد من افتراض وجود قفزة كبيرة بين طاقة القاع والطاقات المحرضة، نرمز لها بـ Δ. لا تتغير طاقة الإلكترون كمربع درجة الحرارة $(C_V \sim T)$ وإنما على الشكل $e^{-\frac{\Delta}{T}}$ $\left(C_V \sim \frac{\Delta}{T^2}e^{-\frac{\Delta}{T}}\right)$؛ وهذا ما أثبتته تجارب عديدة استعملت الأمواج المكروية وتم قياس الطاقة اللازمة لتحريض العينة وجعلها تتجاوز القفزة كتابع لدرجة الحرارة وتبين أن Δ تتناقص بارتفاع درجة الحرارة، الشكل.21



الشكل.21

لقد قضى الفيزيائيون حوالي خمسين عاماً لإرجاع مسألة فائقية التوصيل إلى تفسير القفزة، وهذا ما فعله كوبر، باردن وشريفر Cooper, Bardeen, Schrieffer (CBS) عام 1957.

4.4- هاميلتوني مفعول كوبر

ننظر إلى الإلكترونات في مادة فائقة التوصيل كغاز فيرميوني متدن، قريب من الغاز الكامل تتجاذب جسيماته بدلاً عن أن تتباند. هذه هي فكرة كوبر (1956). لقد فسرنا المغنطيسية الحديدية بتابذ الإلكترونات التي تتوازى سبيناتها كما يتطلب مبدأ الاستبعاد، إلا أنه لا شيء يمنع حسب هذا المبدأ تجاذب الإلكترونات التي يتضاد توازي سبيناتها : تنزع الإلكترونات إلى تشكيل حالات مرتبطة مؤلفة من "أزواج" من الجسيمات تقع في جوار سطح فيرمي (في الفضاء $\bar{p}$) لها اندفاعان متساويان ومتعاكسان وسبينان متضادي التوازي. يعرف هذا النزوع باسم مفعول كوبر. لم تعد مؤثرات الخلق والفناء $a^{\dagger}_{p\sigma}$ و $a_{p\sigma}$ كافية للتعبير عن الحالات المرتبطة لإلكترونين ولذا نضع تركيبين خطيين لهما على الشكل

$$\begin{cases} b_{p-} = u_p a_{p-} + v_p a^{\dagger}_{-p+} \\ b_{p+} = u_p a_{p+} - v_p a^{\dagger}_{-p-} \end{cases} \quad (4.18)$$

حيث p و p- يشيران إلى قيمة الاندفاع و +، - تشيران إلى اتجاهي السبين على محور ما. يقتضي تناحي غاز فيرمي أن يتوقف المعاملان u_p و v_p على القيمة المطلقة للاندفاع $\bar{p}$. يخضع المؤثران الجديدان b إلى قاعدة مبادلة فيرمي (بالمبادل المضاد) وهو أمر ضروري لكي ينتج عنهما أشباه جسيمات فيرميونية :

$$\left[b_{p\sigma}, b^{\dagger}_{p\sigma}\right]_+ = 1 \quad (4.19)$$

تشير σ إلى قيمتي السبين المختلفتين $(\sigma = \pm)$.

بينما تنعدم المبادلات المضادة الأخرى. ينتج عن التبادل المضاد أن

$$\bar{u}_p u_p + \bar{v}_p v_p = 1 \quad (4.20)$$

نختار الطور بحيث يكون المعاملان u_p و v_p حقيقيين، أي

$$u_p^2 + v_p^2 = 1 \quad (4.20)'$$

نستخلص من (4.18)، بكتابتهما من أجل p- أيضاً، أن

$$\begin{aligned} a_{p+} &= u_p b_{p+} + v_p b^{\dagger}_{-p-} \\ a_{p-} &= u_p b_{p-} - v_p b^{\dagger}_{-p+} \end{aligned} \quad (4.18)'$$

نكتب الهاميلتوني على شكل مجموع للهاميلتوني الحر ولهاميلتوني التفاعل زوجاً زوجاً على ألا نأخذ فيه إلا المؤثرات المتعاكسة الاندفاع، نرمز بـ $\vec{p}$ لـ $\vec{p} = \vec{p}_1 = -\vec{p}_2$ وبـ $\vec{p}'$ لـ $\vec{p}' = \vec{p}_1' = -\vec{p}_2'$:

$$H = \sum_{p,\sigma} \frac{p^2}{2m} a^{\dagger}_{p\sigma} a_{p\sigma} - \frac{g}{V} \sum_{p,p'} a^{\dagger}_{p'+} a^{\dagger}_{-p'-} a_{-p-} a_{p+} \qquad (4.21)$$

و g ثابتة اقتران نحسبها على النحو التالي :

لنتصور أولاً آلية تجاذب إلكترونين بالنظر إلى الإلكترون الأول كإلكترون تكافؤ واقع خارج حاجز الكمون U الذي تكونه النواة مع الإلكترونات الأخرى (الإلكترونات الداخلية) وإلى الإلكترون الثاني كأحد مكونات الجسيمات داخل حاجز الكمون المتفاعلة مع إلكترون التكافؤ. نعيد المسألة بهذا الشكل إلى تفاعل إلكترون وارد متجه نحو الذرة، مع أنه في واقع الأمر تفاعل بين الإلكترون والاهتزازات الجماعية لذرات الشبيكة، تفاعل إلكترون–فونون. لقد كتبنا ثانياً السعة في تقريب بورن في التبعثر على الشكل (IV.(8.(3.16)))

$$f^B = \frac{-m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} U(\vec{r}) d\vec{r}$$

سنفرض التبعثر بطيئاً $\vec{q}\vec{r} << 1$ و $e^{-i\vec{q}\vec{r}} \simeq 1$ ونأخذ قيمة وسطية للكمون

$$\frac{U_0}{2} = \int U(\vec{r}) d\vec{r}$$

تأخذ سعة بورن عندئذ القيمة الثابتة والسالبة

$$a = \frac{-mU_0}{4\pi\hbar^2}$$

وتسمى طول التبعثر. وهكذا فإن ثابتة الاقتران بدليل هذه الثابتة هي

$$g = U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 |a|}{m}$$

لعله من الأنسب استبدال هاميلتوني آخر بـ (4.21) يظهر فيه عدد الإلكترونات ويجنبنا أخذ ثبات هذا العدد بعين الاعتبار في كل مرة؛ نكتب هذا الهاميلتوني الجديد على الشكل

$$H' = H - \mu N \qquad (4.21)'$$

حيث μ كمون الإلكترونات الكيميائي و N مؤثر عدد الإلكترونات

$$N = \sum_{p,\sigma} a^{\dagger}_{p\sigma} a_{p\sigma}$$

إن μ قريب من $\mu_0 = \varepsilon_0$ (طاقة فيرمي) كما نعلم، لذا نكتب المقدار

$$\eta_p = \frac{p^2}{2m} - \mu \simeq \frac{p^2}{2m} - \frac{p_F^2}{2m} \simeq V_F (p - p_F) \qquad (4.22)$$

حيث $V_F = \frac{p_F}{m}$ السرعة على سطح فيرمي، وهكذا فالهاميلتوني

$$H' = \sum_{p,\sigma} \eta_p a^{\dagger}_{p\sigma} a_{p\sigma} - \frac{g}{V} \sum_{p,p'} a^{\dagger}_{p'+} a^{\dagger}_{-p'-} a_{-p-} a_{p+} \qquad (4.21)''$$

علينا الآن أخذ مفعول كوبر بعين الاعتبار وكتابة هذا الهاميلتوني بدليل المؤثرات b المعرفة في (4.18) والعلاقات التي تليها لنجد، بحساب جبري بسيط ننطلق فيه من

$$a^{\dagger}_{p+}a_{p+} = u_p^2 b^{\dagger}_{p+}b_{p+} + v_p^2 b_{-p-}b^{\dagger}_{-p-} + u_p v_p\left[b^{\dagger}_{p+}b^{\dagger}_{-p-} + b_{-p-}b_{p+}\right]$$

ونستعمل المبادل $b_{-p+}b^{\dagger}_{-p-} = -b^{\dagger}_{-p-}b_{-p+}$

ومن الحساب المماثل لـ $a^{\dagger}_{p-}a_{p+}$،

أن

$$H' = 2\sum_p \eta_p v_p^2 + \sum_p \eta_p\left(u_p^2 - v_p^2\right)\left(b^{\dagger}_{p+}b_{p+} + b^{\dagger}_{p-}b_{p-}\right) + \quad (4.23)$$

$$2\sum_p \eta_p u_p v_p\left(b^{\dagger}_{p+}b^{\dagger}_{-p-} + b_{-p-}b_{p+}\right) - \frac{g}{V}\sum_{p,p'} B^{\dagger}_{p'}B_p$$

حيث

$$B_p = u_p^2 b_{-p-}b_{p+} - v^2 b^{\dagger}_{p+}b^{\dagger}_{-p-} + v_p u_p\left(b_{-p-}b^{\dagger}_{-p-} - b^{\dagger}_{p+}b_{p+}\right)$$

إن العناصر القطرية لهذا الهاميلتوني معدومة ماعدا تلك التي تحتوي مؤثر عدد أشباه الجسيمات

$$b^{\dagger}_{p\sigma}b_{p\sigma} = n_{p\sigma} \quad \text{و} \quad b_{p\sigma}b^{\dagger}_{p\sigma} = 1 - n_{p\sigma}$$

وهكذا فالطاقة هي

$$E = 2\sum_p \eta_p v_p^2 + \sum_p \eta_p\left(u_p^2 - v_p^2\right)\left(n_{p+} + n_{p-}\right) - \frac{g}{V}\left[\sum_p v_p u_p\left(1 - n_{p+} - n_{p-}\right)\right]^2 \quad (4.24)$$

يعين شرط كون الطاقة أصغرية القيم الممكنة لـ u_p ومعها v_p من أجل كل p. إن $\frac{\delta v_p}{\delta u_p} = -\frac{u_p}{v_p}$ حسب (4.20)'، ومنه بكتابة الجداء على الشكل $\sum_{p,p'}$

$$0 = \frac{\delta E}{\delta u_p} = -\frac{2}{v_p}\left(1 - n_{p+} - n_{p-}\right)\left[2\eta_p u_p v_p - \frac{g}{V}\left(u_p^2 - v_p^2\right)\sum_{p'}\left(1 - n_{p'+} - n_{p'-}\right)\right] \quad (4.24)'$$

ثم بتسمية المقدار

$$\frac{g}{V}\sum_p u_p v_p\left(1 - n_{p+} - n_{p-}\right) = \Delta \quad (4.25)$$

نجد

$$2\eta_p u_p v_p = \Delta\left(u_p^2 - v_p^2\right) \quad (4.26)$$

تعطينا هذه العلاقة مع (4.20)' قيمتي u_p^2 و v_p^2 بدليل Δ، وذلك بحل مربع المعادلة

$$\Delta\left(u_p^2 - 1 + u_p^2\right) = 2\eta_p u_p\left(1 - u_p^2\right)^{1/2}$$

لنجد أن

$$u_p^2 = \frac{1}{2} + \frac{\eta_p}{\sqrt{\Delta^2 + \eta_p^2}}$$

و

$$v_p^2 = \frac{1}{2} - \frac{\eta_p}{\sqrt{\Delta^2 + \eta_p^2}}$$

نتخلص من الجداء $u_p v_p = \frac{\Delta}{2\sqrt{\Delta^2 + \eta_p^2}}$ في (4.25) لنحصل على المعادلة بـ Δ

$$1 = \frac{g}{2V}\sum_p \frac{1 - n_{p+} - n_{p-}}{\sqrt{\Delta^2 + \eta_p^2}} \qquad (4.27)$$

5.4- قفزة الطاقة

إن عدد أشباه الجسيمات في حالة التوازن المستقل عن اتجاه السبين يحدده شرط التوازن $\frac{\partial F}{\partial N} = 0$، F أصغري، أي أن كمون أشباه الجسيمات الكيميائي معدوم – لا علاقة لهذا الكمون الكيميائي بنظيره الإلكتروني. وهكذا فإن عدد أشباه الجسيمات في توزع فيرمي هو

$$n_{p+} = n_{p-} = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon} + 1}$$

سنكتب (4.27) منتقلين من الجمع إلى التكامل ونحسب Δ_0 في درجة الحرارة $T = 0$. لدينا، نظراً لأن $n_p = 0$

$$1 = \frac{g}{2(2\pi\hbar)^3}\int \frac{4\pi p^2 dp}{\sqrt{\Delta_0^2 + \eta_p^2}} \qquad (4.27)'$$

لنلاحظ أنه يستحيل أن يكون لهذه المعادلة حل في حال ثابتة اقتران (كمون) سالبة، $g < 0$، لأن التكامل مقدار موجب؛ لا معنى لها إذاً إلا في حال التجاذب.

تأتي المساهمة الأهم في هذا التكامل من الاندفاعات التي تجعل Δ_0 أصغر ما يمكن أمام η_p : $\Delta_0 << V_F|p_F - p| << V_F p_F - \mu_0$؛ ومن جهة أخرى فإن التكامل متباعد من أجل $p >> p_F$ لأن $\eta_p \sim p^2$ لذا سنفرض أن $p_F^2 = p^2$ في الصورة و $dp = \frac{d\eta}{V_F}$. يأخذ التكامل بوضع حدٍ أعلى لـ η قريب من μ_0 ولنسمه $\tilde{\varepsilon}$، شكلاً لوغاريتمياً :

$$\int \frac{p^2 dp}{\sqrt{\Delta_0^2 + \eta_p^2}} \simeq \frac{p_F^2}{V_F}\int \frac{d\eta}{\left(\Delta_0^2 + \eta^2\right)^{1/2}} \simeq 2\frac{p_F^2}{V_F}\mathrm{Ln}\frac{\tilde{\varepsilon}}{\Delta_0}$$

وأهملنا 1 أمام $\frac{\eta^2}{\Delta_0^2}$ $\left(\Delta_0^2 + \eta^2\right)^{1/2} = \Delta_0\left(1 + \frac{\eta^2}{\Delta_0^2}\right)^{1/2}$

ومنه، بالعودة إلى '(4.27)،

$$\frac{gmp_F}{2\pi^2\hbar^3}\,\mathrm{Ln}\frac{\tilde{\varepsilon}}{\Delta_0} = 1 \qquad (4.27)''$$

ثم، بكتابة ثابتة الإقتران بدليل طول التبعثر $|a|$،

$$\Delta_0 = \tilde{\varepsilon}e^{-\frac{2\pi^2\hbar^3}{gmp_F}} = \tilde{\varepsilon}e^{-\frac{\pi\hbar}{2p_F|a|}} \qquad (4.28)$$

لننظر الآن إلى طيف طاقة أشباه الجسيمات $\varepsilon_{p+} = \varepsilon_{p-} = \varepsilon(p)$ مع الملاحظة منذ البداية أن الطاقة الكلية E للنظمة، التي نعتبرها سائلاً مادمنا لا نعرف الحالة الكمومية للإلكترون، لا تساوي مجموع طاقات أشباه الجسيمات : إن E دالتية لا تختزل إلى التكامل $E = \int n\varepsilon dV$. علينا إذاً، وقد عينا قيمة u_p و v_p، أن نعين الطاقة ε بأخذ المشتق الدالتي لـ E بالنسبة لـ n، وهكذا فإن

$$\varepsilon = \left(\frac{\delta E}{\delta n_{p\sigma}}\right)_{u_p, v_p}$$

نرى من العلاقة (4.24)، بعد كتابة الجداء على الشكل $\sum_{p,p'}$، أن

$$\varepsilon = \eta_p\left(u_p^2 - v_p^2\right) + \frac{g}{V}u_p v_p \sum_{p'} u_{p'} v_{p'}\left(1 - n_{p'+} - n_{p'-}\right)$$

ومن العلاقات التي تليها :

$$\varepsilon(p) = \sqrt{\eta_p^2 + \Delta^2} \qquad (4.29)$$

إن Δ هي أصغر قيمة لطاقة شبه الجسيم، يأخذها حسب (4.22) عندما يكون اندفاعه مساوياً لـ p_F. أو بعبارة أخرى إن قفزة طاقة Δ تفصل بين النظمة المستحثة وحالة القاع وبما أن أشباه الجسيمات فيرميونية سبينها يساوي $\frac{1}{2}$ فهي تظهر على شكل أزواج الفرق بين طاقتها وطاقة القاع تساوي 2Δ.

تتوقف قيمة Δ على درجة الحرارة وبما أن عدد أشباه الجسيمات (أعداد انشغال الحالة Occuption numbers) يتناهى إلى الواحد مع ارتفاع درجة الحرارة فإن Δ تتناقص حسب (4.25) لتنعدم في درجة حرارة منتهية T_c، وهو ما يتفق مع النتائج التجريبية التي عرضناها في مطلع هذه الفقرة. تعبر قفزة الطاقة عن مفعول كوبر، عن تشكيل حالة مرتبطة لأزواج كوبر طاقتها تساوي 2Δ، وهي الطاقة الواجب بذلها لفك الارتباط.

ملاحظات :

1- يجب ألا يفسر ارتباط إلكترونين ببعضهما تفسيراً حرفياً؛ ولعله من الأفضل النظر إلى المسألة من وجهة نظر ترابط correlation حالتي الإلكترونين في فضاء الاندفاعات يؤدي إلى احتمال منته ومقيس. ليكن δp مدى الترابط ويقابل الطاقة Δ اللازمة لتكوين زوج إلكتروني : $\delta p = \frac{\Delta}{V_F}$. يقابل هذا المدى في

الفضاء العادي مسافة ξ تحددها علاقة اللاتحديد $\xi\delta p \sim \hbar$، $\xi = \frac{\hbar V_F}{\Delta}$. طول هذه المسافة في درجة الحرارة $T = 0$ هي $\xi_0 = \frac{\hbar V_F}{\Delta_0}$ وبالتالي فإن (4.28) ترينا (بأخذ $\varepsilon_0 \sim \tilde{\varepsilon}$) أن

$$\xi_0 = \frac{\hbar}{p_F} e^{\frac{\pi \hbar}{2 p_F |a|}} \tag{4.30}$$

إن $\frac{\hbar}{p_F}$ من رتبة المسافة بين الذرات في الغاز الفيرميوني المتدني أي أن ξ_0 كبيرة جداً أمام هذه المسافة وهو ما يبرر إدخال مفهوم الترابط بين إلكترونين على هذه المسافة الكبيرة.

2- تشكل الأزواج الإلكترونية غاز بوز (السبين يساوي الصفر) ويمكنها بالتالي التكثف في طاقة القاع.

3- قلنا إن قفزة الطاقة Δ تابعة لدرجة الحرارة. نحسب هذه التبعية بوضع (4.29) في العلاقة (4.27) ثم تحويل الجمع إلى تكامل وملاحظة أن $n_{p+} = n_{p-}$ لكتابتها على الشكل

$$-1 + \frac{1}{2} g \int \frac{d\bar{p}}{\varepsilon (2\pi\hbar)^3} = g \int \frac{n_p d\bar{p}}{\varepsilon (2\pi\hbar)^3}$$

لا يختلف التكامل في الطرف الأيسر عن التكامل في الدرجة $T = 0$ الذي أعطانا "(4.27) إلا بوضع Δ عوضاً عن Δ_0، وبالتالي فإن الطرف الأيسر هو

$$\frac{-gmp_F}{2\pi^2\hbar^3}\left(Ln\frac{\tilde{\varepsilon}}{\Delta_0} - Ln\frac{\tilde{\varepsilon}}{\Delta}\right) = \frac{gmp_F}{2\pi^2\hbar^3} Ln\frac{\Delta_0}{\Delta}$$

نكتب في الطرف الأيمن $d\bar{p} = 4\pi p^2 dp$ ونتحول إلى المتغير η $dp = \frac{d\eta}{V_F}$ كما أعلاه، لنحصل في النهاية على

$$Ln\frac{\Delta_0}{\Delta} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\eta}{\varepsilon\left(e^{\frac{\varepsilon}{T}} + 1\right)} = 2I\left(\frac{\Delta}{T}\right)$$

حيث

$$I(u) = \int_0^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{x^2 + u^2}\left(e^{\sqrt{x^2 + u^2}} + 1\right)}$$

مددنا التكامل إلى $\pm\infty$ نظراً لتقاربه السريع. لن نحسب التكامل[6] مكتفين بإعطاء النتائج : لدينا في درجات الحرارة المنخفضة $T << \Delta_0$

$$\Delta = \Delta_0\left(1 - \sqrt{\frac{2\pi T}{\Delta_0}} e^{-\frac{\Delta_0}{T}}\right) \tag{4.31}$$

وفي جوار النقطة الحرجة حيث تصبح قفزة الطاقة صغيرة فإن

---

[6] انظر الفقرة 40 Lifchitz, Pitaevskii ،Statistical Physics Part 2 .

$$\text{Ln}\frac{\Delta_0}{\Delta} = \text{Ln}\left(\frac{\pi T}{\gamma\Delta}\right) + 7\zeta(3)\frac{\Delta^2}{8\pi^2T^2} \qquad (4.32)$$

حيث $\text{Ln}\gamma = C = 0,577$ هي ثابتة أولر. نرى من (4.32) أن Δ تنعدم في درجة الحرارة الحرجة

$$T_C = \frac{\gamma\Delta_0}{\pi} = 0,577\Delta_0$$

وهي درجة حرارة صغيرة أمام طاقة فيرمي μ_0. ننشر Δ في جوار هذه الدرجة مكتفين بالدرجة الأولى

$$\Delta = T_C\left[\frac{8\pi^2}{7\zeta(3)}\left(1 - \frac{T}{T_C}\right)\right]^{1/2} = 3,06T_C\sqrt{1 - \frac{T}{T_C}} \qquad (4.33)$$

نحسب الحرارة النوعية انطلاقاً من تغير الطاقة بدليل تغير عدد أشباه الجسيمات

$$\delta E = \sum_p \varepsilon\left(\delta n_{p+} + \delta n_{p-}\right) = 2\sum_p \varepsilon\delta n_p$$

نقسم هذا المقدار على δT ونستعيض عن الجمع بالتكامل على p و V ونستبدل بـ p المتغير η

$$C = V\frac{mp_F}{\pi^2\hbar^3}\int_{-\infty}^{+\infty}\varepsilon\frac{\partial n}{\partial T}d\eta$$

عندما تكون درجات الحرارة صغيرة $T << \Delta$ فإن $n \simeq e^{-\frac{\varepsilon}{T}}$ و $\varepsilon = \Delta_0 + \frac{\eta^2}{2\Delta_0}$، يعطي إنجاز التكامل في هذه الحالة

$$C = \frac{V\sqrt{2mp_F}\Delta_0^{5/2}}{\pi^{3/2}\hbar^3T^{3/2}}e^{-\Delta_0/T}$$

وهكذا تتناقص الحرارة النوعية أسياً مع $T \to 0$ كما يبين المخطط التجريبي، الشكل.19، وهو تناقص ناتج مباشرة عن وجود قفزة الطاقة.

6.4– المقادير الترموديناميكية

لنبدأ بالكمون الترموديناميكي الكبير Ω لأن كل المحاكمة تنطلق من الكمون الكيميائي للإلكترونات وليس من عددها. نكتب كما فعلنا في (1.§2.2) من أجل الطاقة ومن أجل أي وسيط λ

$$\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\lambda}\right)_{T,V,\mu} = \left\langle\frac{\partial H}{\partial\lambda}\right\rangle = \frac{\partial E}{\partial\lambda}$$

نأخذ كوسيط λ ثابتة الاقتران g ولدينا من (4.24) و(4.25)

$$\frac{\partial\Omega}{\partial g} = -V\frac{\Delta^2}{g^2}$$

تتناهى قفزة الطاقة إلى الصفر مع $g \to 0$ ولذا يمكننا مكاملة هذه العلاقة في المجال $[0, g]$ للحصول على الفرق بين Ω_s و Ω_n في درجة حرارة معينة

$$\Omega_s - \Omega_n = -V\int_0^g \frac{\Delta^2}{g^2}dg \qquad (4.34)$$

إن

$$\frac{d\Delta_0}{dg} = \frac{2\pi^2\hbar^3\Delta_0}{mp_F g^2} \qquad (4.28)'$$

حسب (4.28)، في درجة الحرارة $T = 0$.

نحول بفضل هذه العلاقة التكامل على g إلى تكامل على Δ_0 لنجد الفرق بين الكمونين، فائق التوصيل والعادي في حالة القاع

$$\Omega_s - \Omega_n = -\frac{Vmp_F}{4\pi^2\hbar^3}\Delta_0^2 \qquad (4.34)'$$

نطبق من جديد الملاحظة الهامة (((II.(3.(3.9)) التي تبين أن تغيرات مختلف الكمونات عندما تكون صغيرة هي نفسها على Ω، F، E، بشرط تطبيق المتغيرات المقابلة. لدينا إذاً الفرق بين طاقتي القاع E_S و E_n

$$E_S - E_n = -\frac{Vmp_F}{4\pi^2\hbar^3}\Delta_0^2 \qquad (4.34)''$$

تبين إشارة – أن حالة القاع العادية $(E_n > E_S)$ غير مستقرة عندما تتجاذب جسيمات الغاز. يتناسب الفرق بين الحالتين من أجل جسيم واحد مع $\frac{\Delta^2}{\mu}$.

نشتق (4.32) في الحالة النقيضة لـ $T = 0$، أي من أجل $T \to T_C$ بالنسبة لـ g، آخذين بعين الاعتبار (4.28)'

$$\frac{7\zeta(3)}{4\pi^2T^2}\Delta d\Delta = \frac{d\Delta_0}{\Delta_0} = \frac{2\pi^2\hbar^3}{mp_F}\frac{dg}{g^2}$$

نبدل $\frac{dg}{g^2}$ في العلاقة (4.34) بـ $\Delta d\Delta$ المعطاة هنا وننظر إلى (4.34) كفرق بين طاقتي هيلمهولتز

$$F_S - F_n = \frac{-V7\zeta(3)mp_F}{8\pi^4\hbar^3T^2}\int_0^\Delta \Delta^3 d\Delta$$

نكامل مستعملين (4.33) فنحصل على

$$F_S - F_n = \frac{-V2mp_F T_C^2}{7\zeta(3)\hbar^3}\left(1 - \frac{T}{T_C}\right)^2 \qquad (4.35)$$

ومنه

$$S_s - S_n = \frac{-V4mp_F T_C}{7\zeta(3)\hbar^3}\left(1 - \frac{T}{T_C}\right) \qquad (4.36)$$

وبالتالي قفزة الحرارة النوعية، عندما تتناهى T إلى T_C، أي في نقطة عور الطور $\left(C = T\frac{\partial S}{\partial T}\right)$

$$C_s - C_n = \frac{V4mp_F T_C}{7\zeta(3)\hbar^3}$$

نكتب C_n المعطاة بـ '(2.(3.14)) بتبديل N بقيمتها في ((2.(3.1)) على الشكل $C_n = \frac{Vmp_F T}{3\hbar^3}$

وبالتالي

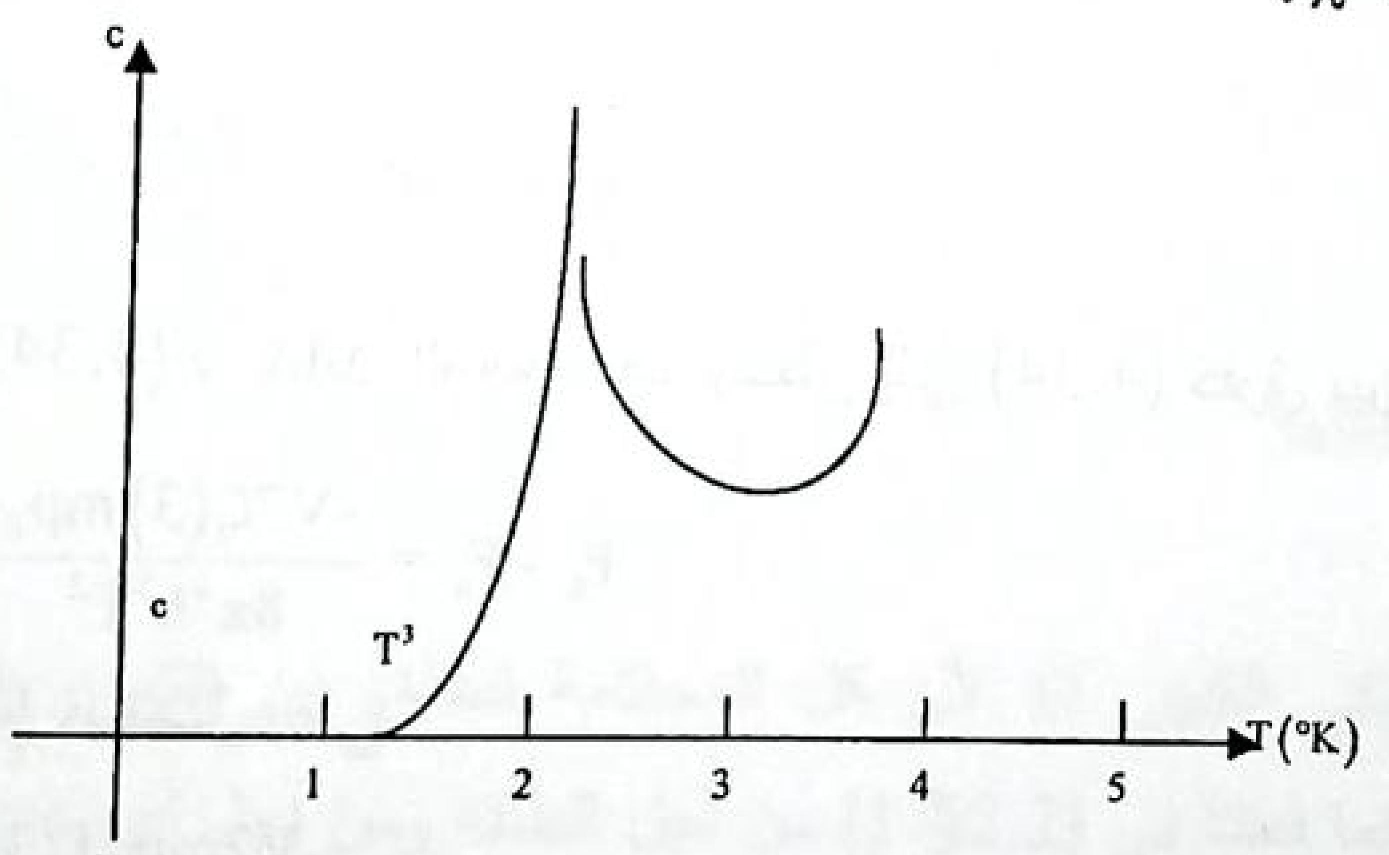
$$\frac{C_S(T_C)}{C_n(T_C)} = \frac{12}{7\zeta(3)} + 1 = 2,43 \quad (4.37)$$

وهي القيمة المعطاة تجريبياً.

5. فائقية السيولة Superfluidity

1.5- الخواص الأساسية للهليوم المائع

تظهر المفاعيل الكمومية في خواص السوائل بشكل جهري في جوار الصفر المطلق. ولا يوجد في حقيقة الأمر إلا مادة واحدة تبقى مائعة حتى هذه الدرجة هي الهليوم، أما السوائل الأخرى فتتجمد كلها قبل أن تصبح المفاعيل الكمومية ملحوظة. يتوقف غليان الهليوم العادي ^4He، الذي يرمز له بـ HeI، فجأة في درجة الحرارة 2,18°K ويظهر الهليوم المائع، المسمى HeII. هذه الظاهرة هي عبور طور من النوع الثاني يحدث فيه انقطاع في الحرارة النوعية ويأخذ منحني تغيراتها شكل الحرف λ، الشكل.22. ولذا تسمى نقطة العبور النقطة λ.



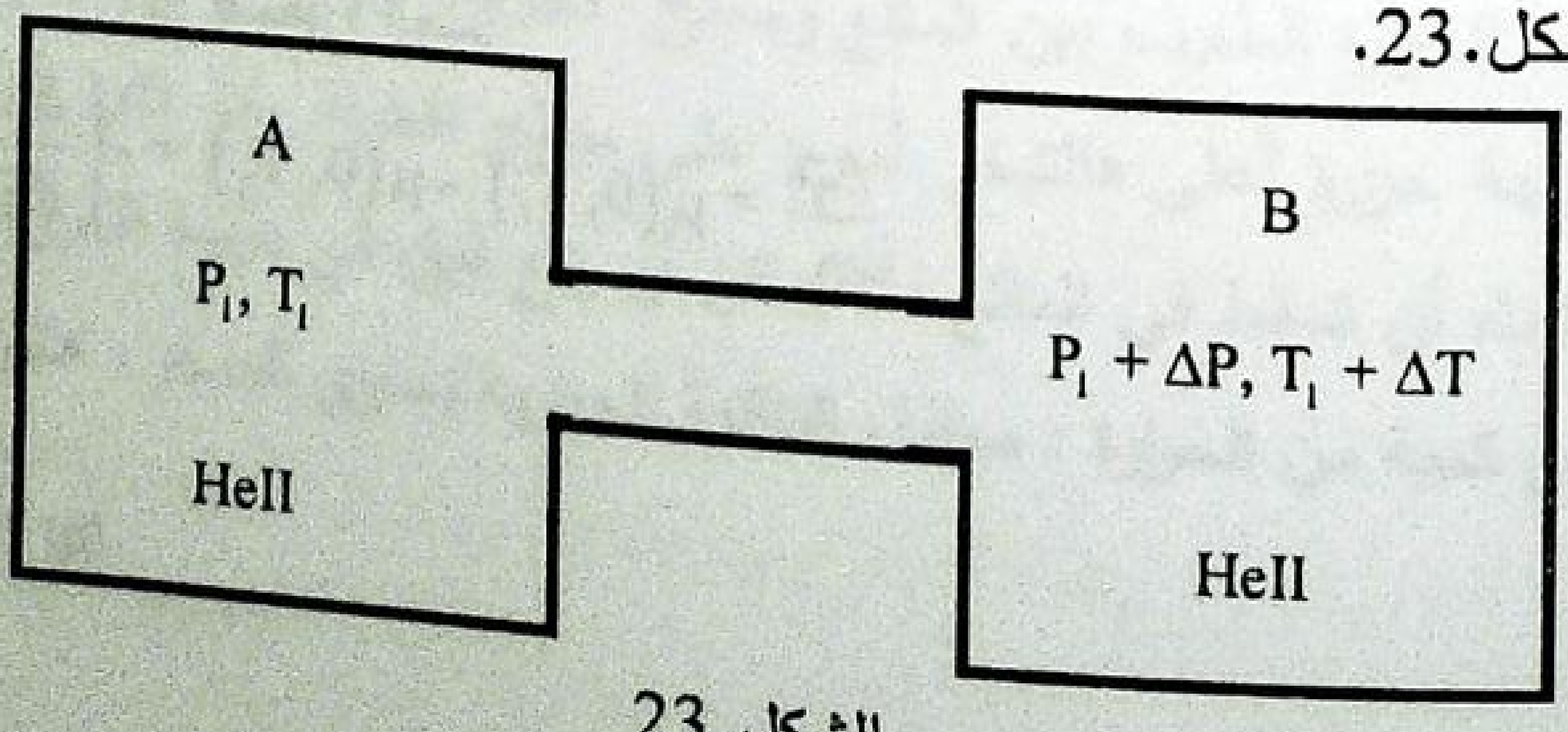
الشكل.22

تتعين قيمة الحرارة النوعية في جوار نقطة العبور تجريباً بالعلاقة

$$C_V = \left.\begin{matrix} a_> \\ a_< \end{matrix}\right\} + bLnc(T - T_\lambda) \quad (5.1)$$

حيث $a_>$ و $a_<$ ثابتتان، الأولى $a_>$ من أجل HeI، $T > T_\lambda$ والثانية $a_<$ من أجل HeII، $T < T_\lambda$؛ لا يمكن حتى الآن استنباط هذه القيمة نظرياً فهي إحدى المسائل التي لم تجد حلاً لها بعد (نعلم أن $C_V \sim T^3$ في جوار الصفر المطلق).

إن أولى خصائص الهليوم المائع هي ما أشرنا إليه من التوقف عن الغليان ولكن التبخر لا يتوقف في درجات الحرارة $T < T_\lambda$. والخاصة الثانية والأهم هي فائقية السيولة التي اكتشفها كابيتزا Kapitza عام 1938 : يمر الهليوم المائع II عبر أنبوب شعري بدون مقاومة، تنعدم اللزوجة عندما تنخفض سرعته إلى أقل من سرعة حدية، V_C، تتناسب عكساً مع قطر الأنبوب الشعري. ليس التدفق عبر الأنبوب الشعري المقياس الوحيد للزوجة. تظهر اللزوجة عندما ندير أسطوانة في وعاء مملوء بالهليوم II ويلاحظ انتقال قسم من عزم الأسطوانة الزاوي إلى الهليوم II. يمكن الجمع بين انعدام اللزوجة في الحالة الأولى وظهورها في الحالة الثانية بافتراض الهليوم II مركباً من مزيج سائلين لا احتكاك بينهما ولا يمكن فصلهما عن بعضهما (لانداو 1941)، أحدهما عديم اللزوجة وكثافته ρ_s (فائق السيولة) وثانيهما ذو لزوجة عادية وكثافته ρ_n. فالسائل الأول هو الذي يتدفق في الأنبوب الشعري والسائل الثاني هو الذي يتفاعل مع حركة الأسطوانة الدورانية. ويمكن تفسير المعطيات التجريبية بفرض أن $\frac{\rho_n}{\rho_s}$ دالة تابعة لدرجة الحرارة. إلا أنه لابد من التأكيد هنا قبل متابعة العرض أن مفهوم السائلين هو مجرد صورة لتوصيف الظواهر الكمومية في HeII، وهو ككل توصيف للظواهر الكمومية بمفاهيم وعبارات تقليدية ليس ملائماً تماماً. لعله من الأفضل القول بوجود حركتين متآينتين في HeII لكل منهما كتلة فعالة (مجموعهما هي كتلة السائل) إحداهما عادية، أي أنها تتمتع بخواص السوائل العادية اللزجة والأخرى غير عادية، فائقة السيولة؛ لا تتبادل هاتان الحركتان أي اندفاع. وهكذا فلا يمر عبر الأنبوب الشعري إلا السائل فائق السيولة ويبقى السائل الآخر عالقاً في الوعاء – سرعة سيلانه في الأنبوب الشعري لا تقارن، لضعفها، بسرعة سيلان السائل فائق السيولة –؛ وفي كل الأحوال فإن لزوجة HeII لا تساوي الصفر. ينتج عن خاصة السيولة خاصة ثالثة هي المفعول الميكانيكي الحراري أو مفعول النافورة. نمثل المفعول الأول بالتجربة التالية : نصل وعائين A و B يحويان على HeII ببعضهما بواسطة أنبوب شعري، بدرجتي حرارة مختلفتين وضغطين مختلفين بحيث يمر السائل من A إلى B. يلاحظ أن A قد سخن و B قد برد في موضع تدفق السائل فيه، الشكل.23.



الشكل.23

تعود سخونة الوعاء A إلى كون السائل الذي يمر في الأنبوب الشعري فائق السيولة، لا احتكاك في حركته ولا يحمل معه بالتالي أي كمية من الحرارة – وأنتروبيته تساوي الصفر. تتوزع الحرارة في A على كمية من الهليوم II أقل مما كانت عليه فيسخن ويحدث العكس تماماً في الوعاء B.

لنرمز بـ s لأنتروبية واحدة الكتلة (غرام واحد) وبـ ρ لكثافة الهليوم II عندما تمر واحدة الكتلة فائقة السيولة من الوعاء A حيث الأنتروبية s_1 ودرجة الحرارة T_1، إلى الأنبوب الشعري فإنها تصدر كمية الحرارة التي تعوض نقصان الأنتروبية، $\Delta Q = T\Delta S = -Ts_1$ وتسخن الوعاء A. يحصل العكس في الوعاء B. لنلاحظ بالمناسبة أن حركة السائل في الأنبوب بأنتروبية ثابتة $s = 0$ هي حركة عكوسة.

لتكن ε_1 و ε_2 الطاقتين الداخليتين لوحدة كتلة الهليوم II في A و B على الترتيب في درجتي الحرارة T_1 و T_2 والضغطين p_1 و p_2. إن شرط التوازن الميكانيكي هو أن تصبح الطاقة الداخلية أصغرية $\varepsilon(S, V, N)$ نتيجة سيلان الهليوم II

$$\left(\frac{\partial \varepsilon_1}{\partial N}\right)_{S_1} = \left(\frac{\partial \varepsilon_2}{\partial N}\right)_{S_2} \tag{5.2}$$

N هي عدد ذرات الهليوم II في واحدة الكتلة. إن مشتق ε بالنسبة لـ N هو الكمون الكيميائي لوحدة الكتلة (كمون الذرة × m^{-1}، حيث m كتلة الذرة) نرمز له بـ μ. نكتب (5.2) على الشكل

$$\mu(p_1, T_1) = \mu(p_2, T_2) \tag{5.3}$$

نفرض p_1 و p_2 صغيرين وننشر طرفي هذه المعادلة في جوار الضغط $p = 0$، ونتوقف عند الحد الثاني

$$\mu(0, T_1) + \left.\frac{\partial \mu}{\partial p}\right|_{p=0} p_1 = \mu(0, T_2) + \left.\frac{\partial \mu}{\partial p}\right|_{p=0} p_2$$

إن $\left(\frac{\partial \mu}{\partial p}\right)_T$ هو الحجم النوعي $V = \frac{1}{\rho}$ الذي يتغير ببطء شديد بتغير درجة الحرارة؛ لدينا بالتالي، عندما نرمز بـ Δp لـ $p_2 - p_1$،

$$V\Delta p = \frac{\Delta p}{\rho} = \mu(0, T_1) - \mu(0, T_2) = \int_{T_1}^{T_2} sdT \tag{5.4}$$

لإن الطرف الأول في هذه العلاقة هو $\int_{T_1}^{T_2} sdT$: $sdT = Vdp$ في حالة التوازن $d\phi = 0$. نكتب (5.4) في حالة كون $\Delta T = T_2 - T_1$ صغيراً أيضاً

$$\frac{\Delta p}{\rho} = \mu(0, T_1) - \mu(0, T_2) = -\left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_p \Delta T$$

لكن $s = -\left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_p$ ومنه

$$\Delta p = \rho s \Delta T \tag{5.5}$$

تعود سخونة الوعاء A إلى كون السائل الذي يمر في الأنبوب الشعري فائق السيولة، لا احتكاك في حركته ولا يحمل معه بالتالي أي كمية من الحرارة – وأنتروبيته تساوي الصفر. تتوزع الحرارة في A على كمية من الهليوم II أقل مما كانت عليه فيسخن ويحدث العكس تماماً في الوعاء B.

لنرمز بـ s لأنتروبية واحدة الكتلة (غرام واحد) وبـ ρ لكثافة الهليوم II عندما تمر واحدة الكتلة فائقة السيولة من الوعاء A حيث الأنتروبية s_1 ودرجة الحرارة T_1، إلى الأنبوب الشعري فإنها تصدر كمية الحرارة التي تعوض نقصان الأنتروبية، $\Delta Q = T\Delta S = -Ts_1$ وتسخن الوعاء A. يحصل العكس في الوعاء B. لنلاحظ بالمناسبة أن حركة السائل في الأنبوب بأنتروبية ثابتة $s = 0$ هي حركة عكوسة.

لتكن ε_1 و ε_2 الطاقتين الداخليتين لوحدة كتلة الهليوم II في A و B على الترتيب في درجتي الحرارة T_1 و T_2 والضغطين p_1 و p_2. إن شرط التوازن الميكانيكي هو أن تصبح الطاقة الداخلية أصغرية $\varepsilon(S, V, N)$ نتيجة سيلان الهليوم II

$$\left(\frac{\partial\varepsilon_1}{\partial N}\right)_{S_1} = \left(\frac{\partial\varepsilon_2}{\partial N}\right)_{S_2} \qquad (5.2)$$

N هي عدد ذرات الهليوم II في واحدة الكتلة. إن مشتق ε بالنسبة لـ N هو الكمون الكيميائي لوحدة الكتلة (كمون الذرة × m^{-1}، حيث m كتلة الذرة) نرمز له بـ μ. نكتب (5.2) على الشكل

$$\mu(p_1, T_1) = \mu(p_2, T_2) \qquad (5.3)$$

نفرض p_1 و p_2 صغيرين وننشر طرفي هذه المعادلة في جوار الضغط $p = 0$، ونتوقف عند الحد الثاني

$$\mu(0, T_1) + \left.\frac{\partial\mu}{\partial p}\right|_{p=0} p_1 = \mu(0, T_2) + \left.\frac{\partial\mu}{\partial p}\right|_{p=0} p_2$$

إن $\left(\frac{\partial\mu}{\partial p}\right)_T$ هو الحجم النوعي $V = \frac{1}{\rho}$ الذي يتغير ببطء شديد بتغير درجة الحرارة؛ لدينا بالتالي، عندما نرمز بـ Δp لـ $p_2 - p_1$،

$$V\Delta p = \frac{\Delta p}{\rho} = \mu(0, T_1) - \mu(0, T_2) = \int_{T_1}^{T_2} sdT \qquad (5.4)$$

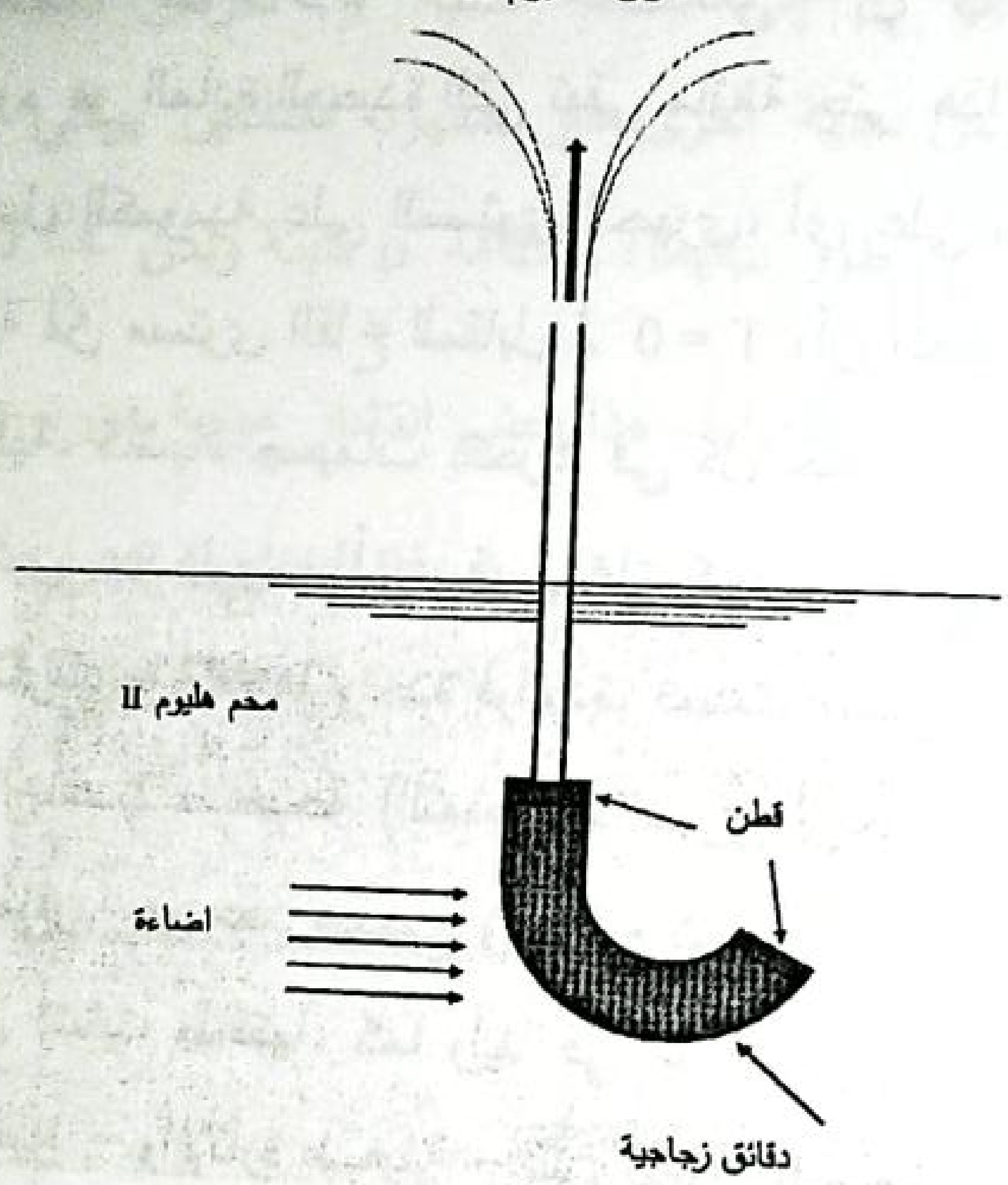
لإن الطرف الأول في هذه العلاقة هو $\int_{T_1}^{T_2} sdT$: $sdT = Vdp$ في حالة التوازن $d\phi = 0$. نكتب (5.4) في حالة كون $\Delta T = T_2 - T_1$ صغيراً أيضاً

$$\frac{\Delta p}{\rho} = \mu(0, T_1) - \mu(0, T_2) = -\left(\frac{\partial\mu}{\partial T}\right)_p \Delta T$$

لكن $-\left(\frac{\partial\mu}{\partial T}\right)_p = s$ ومنه

$$\Delta p = \rho s \Delta T \qquad (5.5)$$

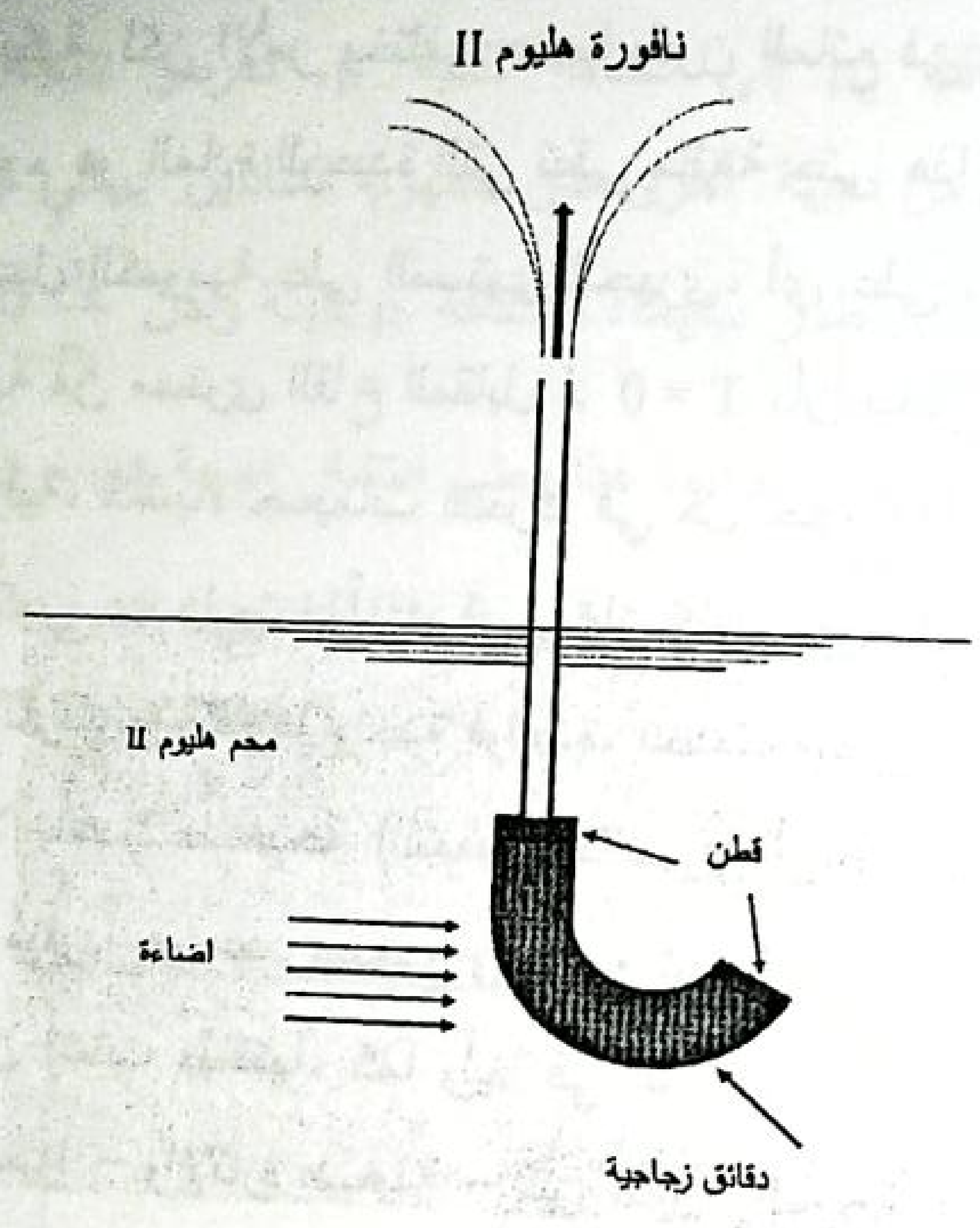
أعطى لندن هذه العلاقة عام 1939. إن كون $s > 0$ يعني أن $\frac{\Delta p}{\Delta T} > 0$. أما (5.5) فتعني أن اختلاف درجة الحرارة بين الوعائين يحدث اختلاف ضغط بينهما وهو المفعول المسمى المفعول الميكانيكي الحراري. يظهر هذا المفعول على شكل نافورة عندما يكون أحد الوعائين أنبوباً رفيعاً، إن فرق الضغط يجعل الهيليوم II يتدفق نحو الأعلى، الشكل.24. أما التبرد والتسخين فيسمى بالمفعول المسعري الميكانيكي.



الشكل.24

يمكن تفسير أغلب خواص الهليوم II انطلاقاً من الخواص والمفاعيل التي ذكرناها. فعندما نضع HeII في أنبوب اختبار فإنه يصعد سطح الأنبوب لينصب على جوانب الإناء إلى أن يفرغ أنبوب الاختبار تماماً (المفروض طبعاً أن تكون درجة الحرارة أقل من T_λ) : تتجاذب جزئيات الأنبوب مع المائع بقوى فان ديرفالس (وهي قوى مدى تأثيرها أكبر بكثير من المسافة بين الذرات) وتتشكل طبقة من المائع على سطح الأنبوب يتناقص سمكها مع الارتفاع عن سطح المائع في الأنبوب. إن ما يمنع الطبقة في الموائع العادية هو فرق درجة الحرارة الطفيف بين المائع وسطح الأنبوب، وبالتالي فرق ضغط التبخر. فإذا كان سطح الأنبوب ذا درجة حرارة أعلى فالتبخر أسرع على سطح الطبقة وإذا كان ذا درجة حرارة أخفض فتتشكل قطرات ما تلبث أن تسقط في المائع. لا يمكن أن يقع فرق في درجة الحرارة في حالة الهليوم II لأنه لا يحمل معه أي كمية من الحرارة : معامل الناقلية الحرارية يساوي الصفر.

أعطى لندن هذه العلاقة عام 1939. إن كون $s > 0$ يعني أن $\frac{\Delta p}{\Delta T} > 0$. أما (5.5) فتعني أن اختلاف درجة الحرارة بين الوعائين يحدث اختلاف ضغط بينهما وهو المفعول المسمى المفعول الميكانيكي الحراري. يظهر هذا المفعول على شكل نافورة عندما يكون أحد الوعائين أنبوباً رفيعاً، إن فرق الضغط يجعل الهيلوم II يتدفق نحو الأعلى، الشكل.24. أما التبرد والتسخين فيسمى بالمفعول المسعري الميكانيكي.



الشكل.24

يمكن تفسير أغلب خواص الهليوم II انطلاقاً من الخواص والمفاعيل التي ذكرناها. فعندما نضع HeII في أنبوب اختبار فإنه يصعد سطح الأنبوب لينصب على جوانب الإناء إلى أن يفرغ أنبوب الاختبار تماماً (المفروض طبعاً أن تكون درجة الحرارة أقل من T_λ) : تتجاذب جزيئات الأنبوب مع المائع بقوى فان ديرفالس (وهي قوى مدى تأثيرها أكبر بكثير من المسافة بين الذرات) وتتشكل طبقة من المائع على سطح الأنبوب يتناقص سمكها مع الارتفاع عن سطح المائع في الأنبوب. إن ما يمنع الطبقة في الموائع العادية هو فرق درجة الحرارة الطفيف بين المائع وسطح الأنبوب، وبالتالي فرق ضغط التبخر. فإذا كان سطح الأنبوب ذا درجة حرارة أعلى فالتبخر أسرع على سطح الطبقة وإذا كان ذا درجة حرارة أخفض فتتشكل قطرات ما تلبث أن تسقط في المائع. لا يمكن أن يقع فرق في درجة الحرارة في حالة الهليوم II لأنه لا يحمل معه أي كمية من الحرارة : معامل الناقلية الحرارية يساوي الصفر.

2.5– الإثارات الأولية في السائل الكمومي البوزوني

إن ما يجعل إعطاء الصيغ العامة للمقادير الترموديناميكية في الحالة المائعة مستحيلاً، خلافاً لما هو عليه الأمر في الحالتين الغازية والصلبة، هو التفاعل القوي بين جزيئات المائع الذي يمنعنا من النظر إليه كاضطراب (ضعيف طبعاً)؛ لابد والحال هذه من معرفة قوانين التفاعل المختلفة من مائع إلى آخر لحساب المقادير الترموديناميكية. لكن الأمر يختلف عندما يكون المائع في جوار الصفر المطلق فالتفاعل ضعيف تعريفاً عندئذ، والهليوم هو المادة الوحيدة التي تبقى مائعة حتى هذا الجوار لأن التفاعل بين ذراته ضعيف أصلاً. تظهر المفاعيل الكمومية على المستوى الجهري، أي على مستوى المائع ككل. وعلينا إذاً دراسة مستويات طاقته القريبة من مستوى القاع المقابل لـ $T = 0$ بأن ننظر إلى تغيرات مستويات الطاقة هذه كإثارات (تحريضات) أولية، كأشباه جسيمات تتحرك في كل حجم المائع بطاقة واندفاع محددين، لا تتفاعل فيما بينها – عندما يكون عددها صغيراً –، فهي غاز كامل. إن أحد نماذج طيف الطاقة للحالات ضعيفة الإثارة هو ظهور الإثارات واختفاؤها واحدة فواحدة، تحدث وتفنى منفردة. ولما كان العزم الزاوي للنظمة الكمومية لا يتغير إلا بأعداد صحيحة (التمثيل التانسوري لزمرة الدورانات (IV.(3.§1.7)) فإن عزم شبه الجسيم الذي يظهر منفرداً هو عدد صحيح ويخضع شبه الجسيم بالتالي إلى توزع بوز.

تتميز أشباه الجسيمات بقوانين تشتت طاقتها، كما رأينا في الفقرة الأولى، بتغير طاقتها بدليل اندفاعها. وعندما يكون هذا الاندفاع صغيراً – والإثارة ضعيفة – فإن طول الموجة $\hbar/p$ كبير يقابل طول الموجة الصوتية في السائل وشبه الجسيم هو الفونون، طاقته كما في (1.15)

$$\varepsilon = cp \tag{5.6}$$

حيث نرمز هنا بـ c لسرعة الصوت في السائل.

يمكننا الآن، وقد عرفنا الطاقة كدالة خطية بالاندفاع الصغير، حساب المقادير الترموديناميكية في جوار الصفر المطلق، حيث الإثارات الأولية ضعيفة، مستعملين الصيغ التي استخلصناها في حالة الجسم الصلب ودرجات الحرارة المنخفضة ((1.(§4.3)) مع الفارق الوحيد وهو أن للصوت اتجاه (استقطاب) واحد في المائع هو الاتجاه الطولاني على خلاف الاتجاهات الثلاثة الممكنة لانتشار الصوت في الجسم الصلب، اتجاه طولاني وآخران عرضانيان. لذا يجب تقسيم كل المقادير الترموديناميكية على 3، فتأخذ الطاقة الحرة القيمة التالية

$$F = F_0 - \frac{V\pi^2T^4}{90\left(\hbar\langle c\rangle\right)^3} \tag{5.7}$$

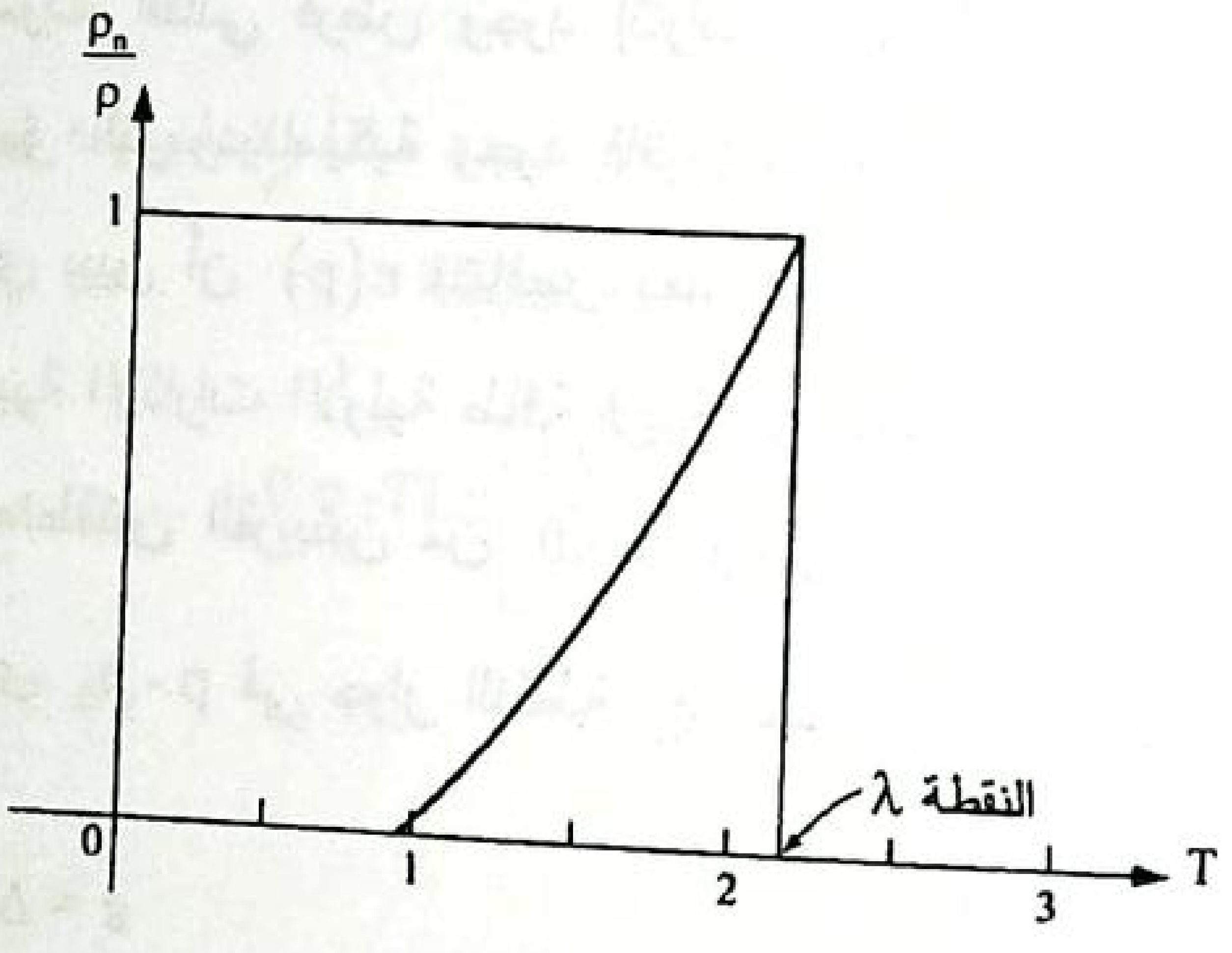
عوضاً عن ((1.(4.11))، حيث F_0 هي الطاقة الحرة في الصفر المطلق. وكذا الأمر فيما يخص المقادير الأخرى ((1.(4.13,14)).

$$E = E_0 + \frac{V\pi^2 T^4}{30(\hbar\langle c\rangle)^3} \quad (5.8)$$

$$C = \frac{2V\pi^2 T^3}{15(\hbar\langle c\rangle)^3} \quad (5.9)$$

وهنا أيضاً C متناسبة مع T^3 في جوار الصفر المطلق.

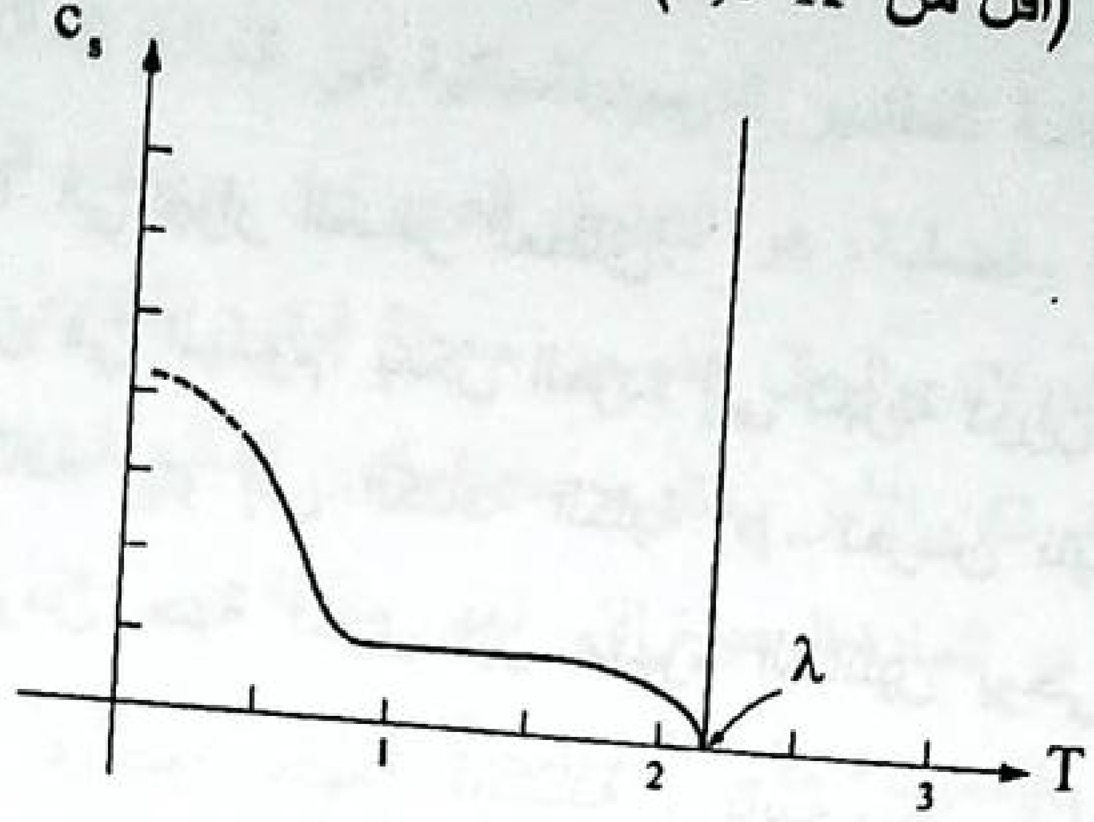
لنعد الآن إلى فرضية السائلين في الهليوم. يمكن العودة إلى تجربة دوران الأسطوانة في الوعاء المملوء بالهليوم II لقياس نسبة الكثافة ρ_n إلى الكثافة الكلية ρ. نعرض نتيجة القياس بالمخطط التالي، الشكل.25. هذا من جهة، ومن جهة أخرى فإن مفهوم السائلين يوحي بانعدام الترابط بين اهتزاز المركبين، الشكل.25. لا يوجد أي طور بينهما، فالكثافة ρ ثابتة ولكن $\frac{\rho_n}{\rho_s}$ تابع لدرجة الحرارة كما أشرنا وبالتالي فإن $\frac{\rho_n}{\rho}$ يتغير بتغير درجة الحرارة. هذا يعني انتشار موجة من نوع جديد تعرف باسم "الصوت الثاني" Second Sound لأنها موجة حرارة (موجة طاقة) تثيرها الحرارة عوضاً عن تغيرات الضغط (دفقاته) في الصوت العادي.



الشكل.25

يرى لانداو أنه يمكن النظر إلى الصوت الثاني كموجة كثافة غاز الفونون. فإذا كانت سرعة الفونون هي c في جوار الصفر المطلق فإن سرعة انتشار الصوت الثاني ونرمز لها بـ c_s هي $c_s = \frac{c}{\sqrt{3}}$ عندما تتناهى $T \to 0$ كما رأينا (2.§4.2).

وقد أثبتت التجارب بعد جدل طويل صحة تنبؤات لانداو بتناهي $c_s \to \frac{c}{\sqrt{3}}$، وفي الواقع فإن $c_s > \frac{c}{\sqrt{3}}$ في درجات الحرارة المنخفضة جداً (أقل من $0,5°K$). يبين المنحني، الشكل.26، تغيرات c_s مع T.



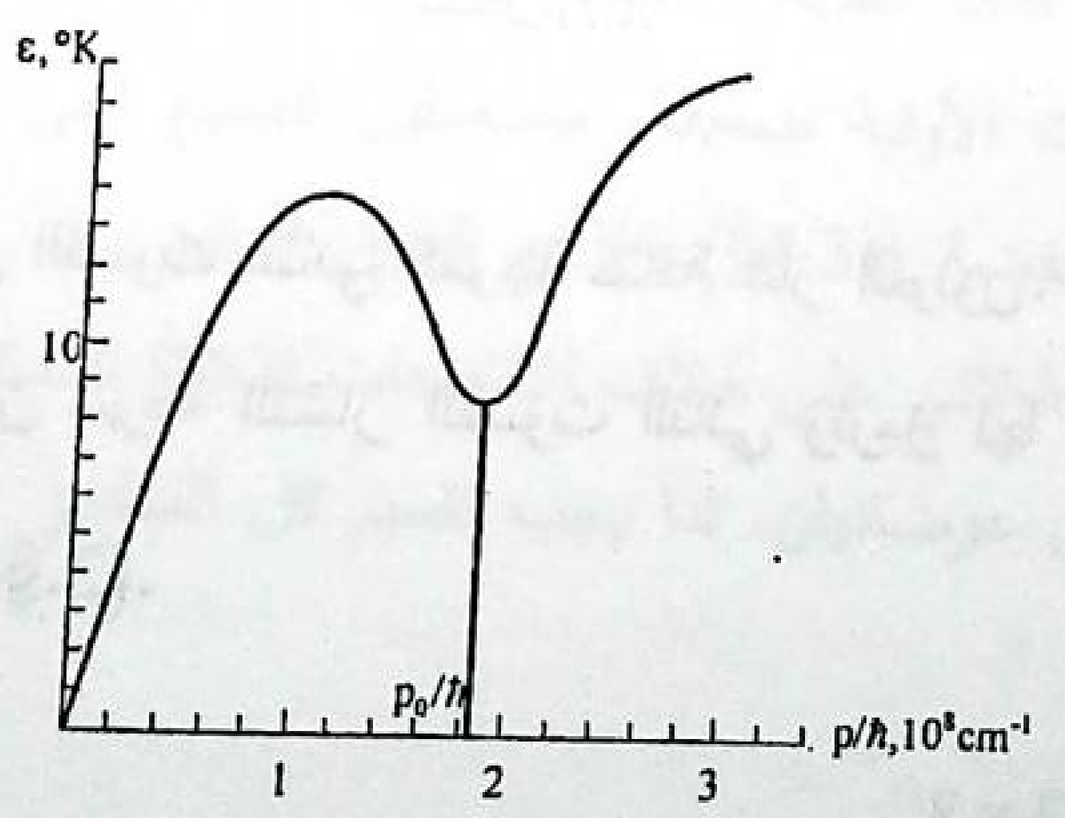
الشكل.26

3.5- الفونون والروتون Roton

وقد بين تحليل الفونون. وقد بين تحليل إضافة إلى الفونون. وقد بين تحليل

يجب لتفسير تغيرات الصوت الثاني فرض وجود إثارات أخرى إضافة إلى الفونون. وقد بين تحليل المعطيات التجريبية للمقادير الترموديناميكية وجود قانون لتشتت الإثارات الأولية أعطى لانداو منحناه (1947)، الشكل.27، الذي يبين أن $\varepsilon(p)$ تتناقص بعد بلوغها نهاية عظمى لتصل إلى نهاية صغرى في النقطة p_0 [7]. تأخذ أغلبية الإثارات الأولية طاقة قريبة من القيمتين الأصغرين في حالة توازن السائل الترموديناميكي. أي في المنطقتين القريبتين من $\varepsilon = 0$ و $\varepsilon(p_0)$. تلعب هاتان المنطقتان دوراً مركزياً. يمكن نشر $\varepsilon(p)$ حسب قوى $p - p_0$ في جوار النقطة p_0، حيث لا وجود للحد الخطي $\left.\frac{d\varepsilon}{dp}\right|_{p=p_0} = 0$:

$$\varepsilon = \Delta + \frac{(p - p_0)^2}{2m^*} \tag{5.10}$$



الشكل.27

[7] أعطى فاينمان الصيغة النظرية لهذا المنحني (1954). يمكن للقارئ الرجوع إلى كتابه الألف الذكر Statistical Mechanics, a set of lectures ص.324 وما يليها.

حيث $\Delta = \varepsilon(p_0)$ و m^* مقداران ثابتان. أطلق لانداو على أشباه الجسيمات في هذه الحالة اسم روتون. إلا أنه لابد من الملاحظة أنه لا فرق بين الفونونات والروتونات فكلاهما أشباه جسيمات تقابل جزئين مختلفين من نفس المنحني وتنتقل بينهما بشكل متصل.

تعطي النتائج التجريبية القيم التالية :

سرعة الصوت $c = 2{,}4 \cdot 10^4$ سم/ثانية

$$\Delta = 8{,}7°K$$

$$p_0/\hbar = 1{,}9 \cdot 10^8 \text{ سم}^{-1}$$

$$m^* = 0{,}16 m^4He$$

تحتوي طاقة الروتون على الدوام على المقدار Δ، وهو مقدار كبير بالنسبة لدرجات الحرارة المنخفضة التي ننظر فيها إلى غاز الروتون، ولذا يمكن توصيف هذا الغاز بتوزع بولتزمان بدلاً عن توزع بوز.

ننطلق إذاً من ((II.(3.(2.20)') لنكتب الطاقة الحرة على الشكل

$$F = -NTLn\left[\frac{eV}{N}\int\frac{e^{-\varepsilon/T}d\bar{p}}{(2\pi\hbar)^3}\right]$$

حيث N عدد جسيمات غاز الروتون، وهو عدد غير محدد سلفاً وإنما يعينه شرط أصغرية الطاقة الحرة، وعليه فإننا نحصل عليه بوضع $\frac{\partial F}{\partial N} = 0$ في العلاقة السابقة

$$0 = -TLn\left[\frac{eV}{N}\int\frac{e^{-\varepsilon/T}d\bar{p}}{(2\pi\hbar)^3}\right] + T = Ln\left(\frac{V}{N}\int\frac{e^{-\varepsilon/T}d\bar{p}}{(2\pi\hbar)^3}\right) \quad (5.11)$$

$$N_r = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\int e^{-\varepsilon/T}d\bar{p} \quad (5.11)'$$

ومنه

$$F = -N_rT = -\frac{VT}{(2\pi\hbar)^3}\int e^{-\varepsilon/T}d\bar{p} \quad (5.12)$$

نبدل ε في هاتين الصيغتين بقيمتها (5.10) فنجد

$$N_r = \frac{(2m^*T)^{1/2}p_0^2V}{(2\pi)^{3/2}\hbar^3}e^{-\frac{\Delta}{T}} \quad (5.13)$$

و

$$F = -N_rT$$

وبالتالي أنتروبية الروتونات

$$S_r = -\frac{\partial F}{\partial T} = N_r\left(\frac{3}{2} + \frac{\Delta}{T}\right) \quad (5.14)$$

وإسهامها في الحرارة النوعية

$$C_r = T\frac{\partial S_r}{\partial T} = N_r\left(\frac{3}{4} + \frac{\Delta}{T} + \frac{\Delta^2}{T^2}\right) \quad (5.15)$$

نرى أن إسهام الروتونات في المقادير الترموديناميكية، انطلاقاً من N_r في (5.13) تابع أسياً لدرجة الحرارة، ولهذا فإن هذا الإسهام ضعيف في درجات الحرارة المنخفضة (حوالي $0,8°K$ من أجل الهليوم المائع) أمام الفونونات، وعلى العكس فإنه الإسهام الأهم من أجل درجات الحرارة المرتفعة.

4.5- فائقية السيولة

لنبدأ بحساب السرعة اللازمة لإثارة شبه الجسيم ولننظر إلى المائع الذي يجري في أنبوب شعري بسرعة ثابتة V، والتي كانت ستتباطأ لو كان للمائع لزوجة تبدد طاقته الحركية.

أ- سندرس جريان الحركة في نظمة محاور K مرتبطة بالمائع وفي جوار الصفر المطلق (سرعته فيها معدومة وسرعة جدران الأنبوب $\vec{V}$-). لن تبقى سرعة المائع معدومة في هذه النظمة إن وجدت اللزوجة، ولن يبدأ بالتحرك ككل نتيجة جر جدران الأنبوب له إلا مع ظهور الإثارات الأولية شيئاً فشيئاً فيه. ليكن $\vec{p}$ اندفاع إثارة أولية و $\varepsilon(p)$ طاقتها. تصبح طاقة المائع – التي كانت مساوية للصفر في النظمة K – E_0 واندفاعه P_0 و $\vec{P}_0 = \vec{p}$. لدينا، عندما نعود إلى نظمة المحاور المخبرية، حيث الأنبوب الشعري هو الساكن، الاندفاع الكلي للمائع

$$\vec{P} = \vec{P}_0 + M\vec{V}$$

وطاقته الكلية

$$E = \frac{p^2}{2M} = E_0 + \vec{P}_0 V + \frac{MV^2}{2} \quad (5.16)$$

M كتلة المائع.

إن $E_0 = \varepsilon(p)$ و $\vec{P}_0 = \vec{p}$ وبالتالي

$$E = \varepsilon + \vec{p}\vec{V} + \frac{MV^2}{2} \quad (5.16)'$$

إن $\frac{MV^2}{2}$ هي طاقة المائع الحركية البدائية والمقدار $\varepsilon + \vec{p}\vec{V}$ هو تغير هذه الطاقة نتيجة ظهور الإثارة الأولية، وهو تغير سالب لأن الطاقة الكلية تتناقص بالضرورة

$$\varepsilon + \vec{p}\vec{V} < 0$$

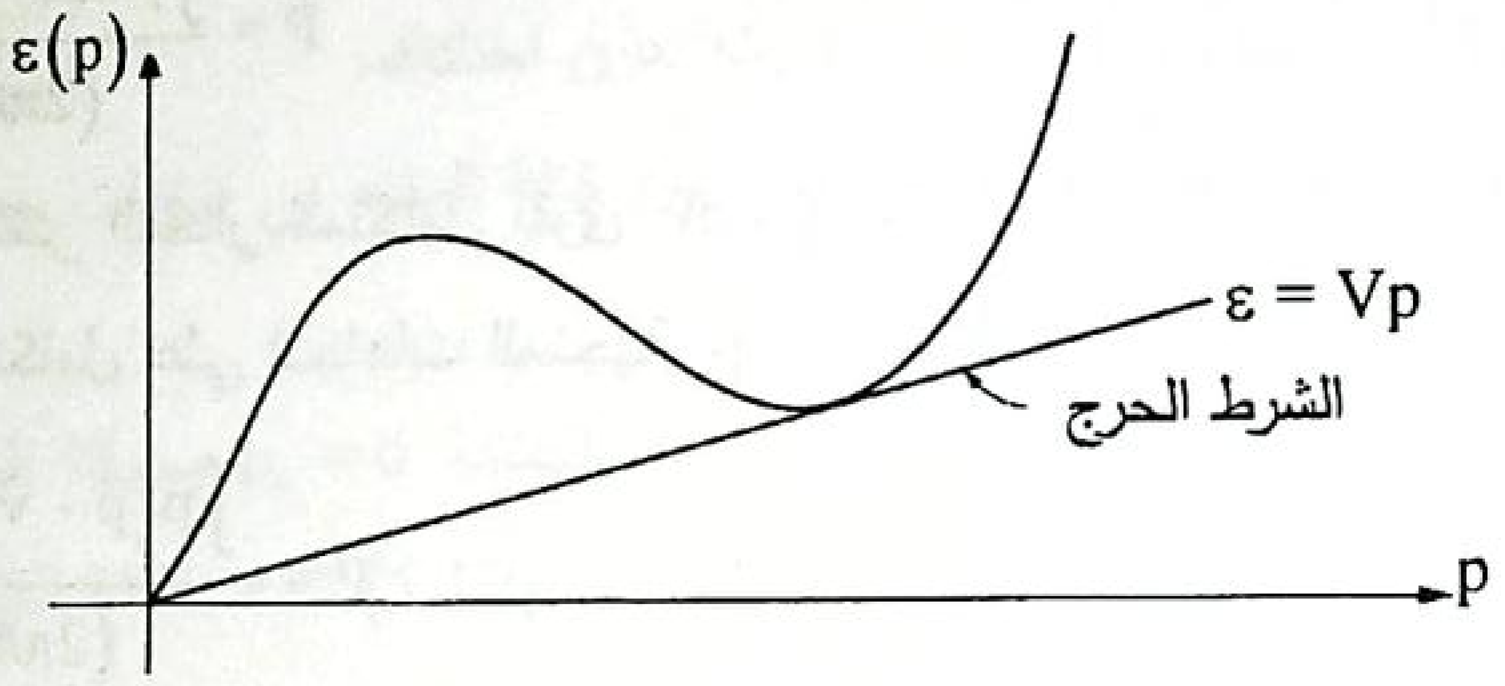
والقيمة الصغرى للطرف الأيسر في هذه المتراجحة، من أجل $\vec{p}$ معطاة، هي عندما تكون المتجهتان $\vec{p}$ و $\vec{V}$ متضادتي التوازي. يجب إذاً أن يكون لدينا دوماً

$$\varepsilon - pV < 0$$

أو

$$V > \frac{\varepsilon}{p} \qquad (5.17)$$

تتحقق هذه المتراجحة بقدر ما يكون $\frac{\varepsilon}{p}$ صغيراً، فالشرط اللازم إذاً لظهور الإثارة في المائع هو أن يكون $\frac{\varepsilon}{p}$ أصغرياً. إن $\frac{\varepsilon}{p}$ هو مماس الزاوية بين المستقيم الواصل بين O ونقطة من المنحني $\varepsilon(p)$ في المستوي (p, ε) ومحور الفصول p، ويأخذ قيمته الصغرى عندما يكون هذا المستقيم مماساً للمنحني؛ فإذا كانت هذه القيمة مختلفة عن الصفر وكانت سرعة المائع صغيرة – لا تحقق الشرط (5.17) – فلا ظهور للإثارات، مما يعني أن السائل لن يتباطأ وظاهرة فائقية السائلية محققة. الشكل.28. إن السرعة الحرجة المحسوبة في هذا الشرط هي بحدود 60 متراً في الثانية ويمكن القول أن هذا هو سبب كون الهليوم فائق السيولة. إلا أن الإثارات الأولية تظهر بدءاً من سرعة تساوي لسنتمتر واحد في الثانية.



الشكل.28

ومادمنا في جوار الصفر المطلق وقبل ظهور أي إثارة فإن شرط عدم ظهورها في نقطة المبدأ هو ألا يكون المنحني مماساً لمحور الفواصل في النقطة O. أو بتعبير آخر فإن شرط فائقية السائلية هو أن تظهر الإثارات الضعيفة على شكل فونونات.

ب- ندرس جريان الحركة في نفس النظمة K في درجات حرارة مختلفة عن الصفر المطلق (الباقية طبعاً قريبة منه، إلى حد 2,18°K) ولكن ليس في جواره. لا يوجد المائع في حالة القاع كما في أ- بل يحتوي على إثارات لا تحقق الشرط (5.17)، مما يعني أنه لا تظهر إثارات أولية جديدة. إلا أنه من الضروري معرفة حركة الإثارات الموجودة أصلاً في المائع : نتخيل أن "غاز أشباه الجسيمات" يتحرك بمجمله حركة انسحابية بسرعة $\vec{v}$ بالنسبة للمائع. نحصل على دالة توزع الغاز المتحرك بمجمله بالسرعة $\vec{v}$ من دالة التوزع $n(\varepsilon)$ لجسيمات الغاز الساكن باستبدال ε بالمقدار $\varepsilon - \vec{p}\vec{v}$ حيث $\vec{p}$ اندفاع الجسيم[8].

[8] هذه العلاقة نتيجة مباشرة لمبدأ النسبية الغاليلية عندما يتحرك الغاز في نظمة محاور غاليلية، أي في الخلاء، ولكن غاز أشباه الجسيمات يتحرك في المائع. ولذا يلزم برهانها بأن نأخذ محاور K' مرتبطة بالغاز، يتحرك المائع فيها بسرعة $-\vec{v}$، لدينا في النظمة K المرتبطة بالمائع (الساكن)

لنلاحظ أن توزع بوز المعطى بالعلاقة

$$n(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon(p)}{T}} - 1}$$

يتحول إلى

$$n(\varepsilon - \vec{p}\vec{v}) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon(p) - \vec{p}\vec{v}}{T}} - 1}$$

وهو مقدار موجب ومنته من أجل كل الطاقات عندما يتحقق شرط فائقية السيولة

$$v < \frac{\varepsilon}{p}$$

لنحسب الاندفاع الخطي لغاز أشباه الجسيمات

$$\vec{P} = \frac{\int \vec{p} n(\varepsilon - \vec{p}\vec{v}) d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}$$

نفترض $\vec{v}$ صغيرة وننشر المقدار المتكامل بقوى $\vec{p}\vec{v}$. إن تكامل الحد الأول في هذا النشر، القوة صفر، يساوي الصفر عندما نكامل على اتجاهات المتجهة $\vec{p}$. والحد الثاني هو

$$\vec{P} = -\frac{\int \vec{p}(\vec{p} \cdot \vec{v}) \frac{dn}{d\varepsilon} d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}$$

نأخذ قيمة وسطية لاتجاهات $\vec{p}$: $\frac{p}{3}$، ونكامل بعد ذلك بوضع $d\vec{p} = 4\pi p^2 dp$ لنجد أن

$$\vec{P} = -\frac{4\pi}{3} \vec{v} \frac{\int p^4 \frac{dn}{d\varepsilon} dp}{(2\pi\hbar)^3} \qquad (5.18)$$

تتناسب ε حسب (5.6) مع سرعة الصوت التي رمزنا لها بـ c: $\varepsilon = cp$ نكامل (5.18) بالتجزئة لنجد، بملاحظة أن المقدار المكامل معدوم،

$$\vec{P} = -\vec{v} \frac{4\pi}{3c} \int_0^\infty p^4 \frac{dn(p)}{dp} \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3} = \vec{v} \frac{16\pi}{3c} \int_0^\infty p^3 n(p) \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3}$$

لكن التكامل

$$\int_0^\infty cpn(p) 4\pi \frac{p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} = \int_0^\infty \varepsilon n(\varepsilon) \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} = E_{ph}$$

المقابلة لنظمة الأنبوب الشعري الساكن في (5.16) $E = E_0 - \vec{P}_0\vec{v} + \frac{MV^2}{2}$؛ تصبح طاقة الإثارة $\varepsilon(p)$ في K، $\varepsilon - \vec{p}\vec{v}$ في K' حسب (5.16)'.

هو طاقة وحدة حجم غاز الفونونات وبالتالي فإن

$$\vec{P} = \vec{v}\frac{4E_{ph}}{3c^2} \tag{5.19}$$

نرى من العلاقتين (5.18،19) أن حركة أشباه الجسيمات مصحوبة بنقل كمية من المادة؛ يحدد مثل التناسب بين $\vec{P}$ و $\vec{v}$ كتلة واحدة حجوم الغاز الفعالة. ثم إنه ما من شيء يمنع "جسيمات" هذا الغاز عندما تجري عبر الأنبوب الشعري من الاصطدام بجدرانه وتبادل الاندفاع معها على غرار ما يقع للغاز العادي، وهو ما يؤدي إلى إبطائه. يمكننا إذاً القول إن جزءاً من المائع يسلك، في درجات الحرارة المختلفة عن الصفر، سلوك المائع اللزج العادي، "يلتصق" بجدران الوعاء عندما يتحرك. أما الجزء الآخر فيسلك سلوك المائع فائق السيولة الذي لا لزوجة له. ويجب الإلحاح بالقول إن هذين الجزئين يتحركان بدون احتكاك بينهما – لا يحدث أي تبادل للاندفاع بينهما – ويمر أحدهما عبر الآخر. لأن وجود هذه الحركة مستنبط من التوازن الإحصائي لغاز الإثارة ذي الحركة المنتظمة، فكل حركة نسبية في حال التوازن الترموديناميكي هي حركة لا تبديد للطاقة فيها : حركة بدون احتكاك.

ينتج مما سبق أن (5.19) هي اندفاع الجزء العادي من كتلة المائع في درجات حرارة منخفضة إلى حد يسمح لنا النظر إلى الإثارات الأولية كفونونات.

عندما تكون درجة الحرارة $T = 0$ فإن القسم العادي من الكثافة $\rho_n = 0$ وحركة المائع كله حركة فائقة السيولة. أما عندما ترتفع درجة الحرارة وتظهر الإثارات فإن (5.19) تحدد كثافة الكتلة هذه، بأخذ (5.8) التي تحدد طاقة الفونون

$$\left(\rho_n\right)_{ph} = \frac{4E_{ph}}{3c^2} = \frac{2\pi^2T^4}{45c^5\hbar^3} \tag{5.20}$$

نلاحظ لحساب كثافة الكتلة للروتون أن هذا الأخير يخضع لتوزع بولتزمان وبالتالي $\frac{dn}{d\varepsilon} = -\frac{n}{T}$. نضع هذا المقدار في (5.18)

$$\vec{P} = \vec{V}\left(\rho_n\right)_r$$

$$\left(\rho_n\right)_r = \frac{4\pi}{3T\left(2\pi\hbar\right)^3}\int p^4 n dp$$

إن

$$\frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^3}\int 4\pi n p^4 dp = \frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^3}\int p^2 n d\bar{p} = \left\langle p^2\right\rangle \Big/ \frac{V}{N_r}$$

حيث نظمنا الاحتمال للواحد $\frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^3}\int n d\bar{p} = \frac{N_r}{V}$ (V هو الحجم)؛ حسبنا N_r في (5.13)، نأخذ $\left\langle p^2\right\rangle = p_0^2$ كتقريب فنحصل على

$$\left(\rho_n\right)_r = \frac{p_0^2 N_r}{3TV} = \frac{2\left(m^*\right)^{1/2} p_0^4}{3\left(2\pi\right)^{3/2} T^{1/2}\hbar^3} e^{\frac{\Delta}{T}} \tag{5.21}$$

إن إسهام $(\rho_n)_{ph}$ في كثافة المائع العادي أكبر بكثير من $(\rho_n)_r$ في جوار الصفر المطلق، يتساوى المقداران في درجة الحرارة $T = 0,6°K$ ويصبح إسهام $(\rho_n)_r$ هو الغالب بعد هذه الدرجة.

ترتفع نسبة كتلة المائع العادي بارتفاع درجة الحرارة ويصبح المائع عادياً كله، $\rho_n = \rho$ في النقطة λ، نطقة عبور الطور من النوع الثاني التي يأخذ فيها وسيط الانتظام ρ_s القيمة $\rho_s = 0$. هذا من وجهة النظر الجهرية، أما من وجهة النظر المجهرية فيتعلق الأمر ببعض خواص توزع الاندفاع لجسيمات المائع: إن نسبة منتهية من هذه الجسيمات (أي عدداً كبيراً منها من وجهة النظر الجهرية) معدومة الاندفاع تماماً $(p = 0)$. تشكل هذه الجسيمات تكثف بوز–آنشتاين في فضاء الاندفاعات. تقع كل ذرات الغاز الكامل البوزوني في المكثف في الصفر المطلق $T = 0$، ويقع أغلبها في المكثف عندما يكون الغاز البوزوني قريباً من الكمال. وتقل النسبة الواقعة في المكثف بصورة عامة في حالة المائع البوزوني الذي تتفاعل جسيماته بقوة فيما بينها. ويمكن التعبير عن خواص تكثف بوز–آنشتاين انطلاقاً من مؤثر الموجة (في تمثيل هايزنبرغ)

$$^{9}\psi(b,r) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_p a_p e^{\frac{i}{\hbar}\left(\vec{p}\cdot\vec{r}-\frac{p^2}{2m}t\right)}$$

لنختم هذه الفقرة بالملاحظة الهامة التالية : يرى فاينمان في المرجع الذي سبق ذكره أنه لا يمكن تفسير فائقية السيولة بديناميك السوائل الكمومي كما فعل لانداو الذي قبل ضمناً بالتمييز بين جسيمات السائل مما يجعل تطبيق الإحصاء الكمومي مستحيلاً، وهو طبعاً محق في هذا الدحض. ولكنه يرى أيضاً أن مقاربة لانداو تقتضي أمرين، أولهما إمكانية عبور الطور للنظير ^3He إضافة إلى ^4He وثانيهما أن تكثف بوز ليس هو سبب العبور. إلا أن استحالة وقوع العبور في حالة الهليوم 3 رغم الوصول إلى درجات حرارة منخفضة جداً يلقي بعض الشكوك على فرضية لانداو. لم تعد هذه الحجة قائمة الآن، فقد اكتشف في منتصف سبعينات القرن الماضي (بعد صدور كتاب فاينمان) أن ^3He فائق السيولة في درجة الحرارة $0,0025°K$ – وحصل مكتشفوه على جائزة نوبل عام 1996 – وبالتالي أن تكثف بوز في واقع الأمر ليس هو سبب العبور، فذرات ^3He فيرميونات لا تتنابذ بل تتجاذب لتشكل أزواجاً على غرار ما رأيناه في فائقية التوصيل. وتفسر فائقية السيولة هنا بنظرية CBS لفائقية التوصيل.

[9] انظر الفقرة 26 من الجزء الثاني لـ Lifchitz, Pitaevskii ،Statistical Physics الآنف الذكر.

الفصل الرابع

نظرية الاضطرابات

1- النشر الاضطرابي لمؤثر الكثافة........ 167
2- دالات غرين.............................. 177
3- مخططات فاينمان......................... 194

1. النشر الاضطرابي لمؤثر الكثافة

1.1- معادلة بلوخ Block

لنكتب مؤثر الكثافة غير المنظم – الذي لا يأخذ بعين الاعتبار ثابتة التنظيم $Z = Tr\rho$ – على الشكل

$$\rho = e^{-\beta H} \tag{1.1}$$

حيث $\beta = \frac{1}{T}$، ولنأخذ مشتقه بالنسبة لـ β، أي خارج حالة التوازن الترموديناميكي، لنحصل على المعادلة التالية

$$\frac{\partial \rho}{\partial \beta} + H\rho = 0 \tag{1.2}$$

تماثل هذه المعادلة معادلة شرودينغر التي يخضع لها مؤثر التطور $U(t, t_0)$؛ ويكفي لرؤية ذلك أن نبدل β بـ $\frac{it}{\hbar}$ في تعريف ρ وفي المعادلة التفاضلية التي يحققها، المسماة بمعادلة بلوخ. وهكذا فإن β تقابل صورياً زمناً تخيلياً بحتاً $(\hbar = 1)$.

لنلاحظ أنه من الممكن إعطاء صيغة تحليلية لمؤثر الكثافة بدليل دالة الموجة. لدينا، على سبيل المثال في التمثيل q : $\rho(q', q; \beta) = \langle q'|\rho|q\rangle$ وتأخذ القيمة الوسطية لمؤثر ما A الشكل التحليلي

$$\langle A\rangle = Tr\rho A = \int dq\langle q|\rho A|q\rangle = \int dq\langle q|\rho IA|q\rangle$$

$$= \int dq\langle q|\rho\int dq'|q'\rangle\langle q'|A|q\rangle$$

$$\langle A\rangle = \int dq dq'\rho(q, q')A(q', q)$$

لدينا مثلاً من أجل مؤثر الوضع $A = x$

$$A(x', x) = \langle x'|x|x\rangle = x\delta(x' - x)$$

و

$$\langle x\rangle = \int dx dx'\rho(x, x')x\delta(x' - x)$$

$$\langle x\rangle = \int dx\, x\rho(x, x)$$

ومن أجل مؤثر الاندفاع في التمثيل x

$$A = p^{(1)} = \int dx'|x'\rangle\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\langle x'|$$

$$A(x',x) = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\delta(x'-x)$$

نلاحظ لحساب القيمة الوسطية لمؤثر الاندفاع، أن التكامل بالتجزئة أياً كانت الدالة f

$$\int f(x)\vec{\nabla}\delta(x'-x)\,dx = -\vec{\nabla}f(x')$$

لأن

$$f(x)\delta(x'-x) = 0$$

ومنه

$$\langle P\rangle = \int dx\,dx'\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\delta(x'-x)\rho(x,x')$$

أو

$$\langle P\rangle = -\frac{\hbar}{i}\int dx\vec{\nabla}\left[\rho(x,x')\right]_{x'=x}$$

نكتب معادلة بلوخ في التمثيل q على الشكل

$$\frac{\partial\rho(q,q';\beta)}{\partial\beta} + H_q\rho(q,q';\beta) = 0 \qquad (1.2)'$$

حيث الدليل q في الهاميلتوني للتذكير أنه يفعل على المتغير q في مؤثر الكثافة.

لنأخذ معادلة بلوخ في شكلها التحليلي في حالة هزاز توافقي هاميلتونيه الحر $H = \frac{p^2}{2m}$ وفي التمثيل q، $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_q^2$. تأخذ $(1.2)'$ الشكل

$$\frac{\partial\rho(q,q';\beta)}{\partial\beta} - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_q^2\rho(q,q';\beta) = 0 \qquad (1.2)''$$

نكتب ρ بدليل دالات الموجة، قاعدة الفضاء الهيلبرتي، $I = \sum_i |i\rangle\langle i|$

$$\rho(q,q';\beta) = \langle q|\rho|q'\rangle = \sum_i p_i\langle q|i\rangle\langle i|q'\rangle \qquad (1)$$

$$= \sum_i e^{-\beta E_i}\, i(q)\,\bar{i}(q') \qquad (2)$$

حيث $p_i = e^{-\beta E_i}$ هو احتمال الوجود في الحالة i، E_i طاقة هذه الحالة، والعارضة تشير إلى العقدي المرافق. نحول الجمع على كل الحالات إلى تكامل عندما يكون الهزاز في وعاء حجمه V

$$\sum_i \to \int\frac{V d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}$$

وتأخذ متجهة الحالة الشكل

$$i(q) = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\frac{\vec{q}\cdot\vec{p}}{\hbar}} \qquad (3)$$

والطاقة E_i القيمة المتصلة $\frac{p^2}{2m}$. تصبح (1)

$$\rho(q,q';\beta) = \int\frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}e^{-\frac{\beta p^2}{2m}}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot(\vec{q}-\vec{q}')}$$

وترينا أن $e^{\frac{\beta p^2}{2m}}$ هي محول فوريي لمؤثر الكثافة. نعلم (IV.2§1.6) أن محول فوريي العكسي لدالة غاوصية دالة غاوصية $\varphi(\bar{p})$ دالة غاوصية $\varphi(\bar{q})$. ثابتة التناسب $4a = \frac{2m}{\beta\hbar^2}$ و $\varphi(\bar{q})$ متناسب مع $\left(\frac{a}{\pi}\right)^{3/2}$؛ أي أن

$$\rho(q, q'; \beta) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}\right)^{3/2} e^{-\frac{m}{2\hbar^2\beta}|q-q'|^2} \quad (4)$$

لقد أغنتنا كتابة ρ بدليل متجهات الموجة وملاحظة تحول الدالات الغاوصية إلى دالات غاوصية بتحول فوريي عن حل معادلة الانتشار "(1.2)".

أما في حالة وجود القوة المتناسبة مع الاستطالة، فإن الهاملتوني هو

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2}$$

ومعادلة بلوخ

$$\frac{\partial\rho}{\partial\beta} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2}\rho + \frac{m\omega^2 q^2}{2}\rho = 0 \quad (5)$$

نقوم بإدخال المتغيرين الجديدين

$$f = \frac{\hbar\omega}{2}\beta \quad ; \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, q$$

وتأخذ (5) الشكل المبسط

$$\frac{\partial\rho}{\partial f} - \frac{\partial^2\rho}{\partial\xi^2} + \xi^2\rho = 0 \quad (5)'$$

والشرط الابتدائي هو $\rho = \delta(q - q')$ من أجل $f = 0$، أي

$$\rho = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\delta(\xi - \xi') \quad (6)$$

ذلك أن $\delta(\alpha x) = \frac{1}{|\alpha|}\delta(x)$.

عندما تكون درجة الحرارة مرتفعة، فإن f صغير، هذا من جهة، ومن جهة أخرى فإن الحرارة المرتفعة تعني ارتفاع السرعة وارتفاع الطاقة الحركية أمام الطاقة الكامنة، أو بعبارة أخرى أن الهزاز أقرب ما يكون إلى الهزاز الحر؛ لذا يمكن تصور الحل في هذه الحالة على شكل الحل (4) وكتابة الحل المطلوب نظراً لأن $\frac{m}{2\hbar^2\beta} = \frac{\frac{m\omega}{\hbar}}{4f}$

$$\rho(\xi, \xi'; f) = \sqrt{\frac{m\omega}{4\pi\hbar f}}\, e^{-(\xi-\xi')^2/4f} \quad (7)$$

نجرب حلاً من الشكل التالي

$$\rho = e^{-a(f)\xi^2 + b(f)\xi + c(f)} \qquad (8)$$

نبدل هذا المقدار في '(5) ونقارن أمثال ξ^2، ξ، ξ^0 فنجد المعادلات التفاضلية من الرتبة الأولى بـ a، b، c، وهي

$$a' = 1 - 4a^2$$
$$b' = -4ab$$
$$c' = 2a - b^2$$

لا توجد صعوبة تذكر في مكاملة هذه المعادلات الخطية، لأن $(\coth x)' = 1 - \coth^2 x$ ومنه

$$a = \frac{1}{2}\coth 2f$$

لأن $a(0) = 0$ لأن ρ معدوم في هذه النقطة حسب (6).

لدينا كذلك كما في الحالة المثلثاتية

$$b = \frac{A}{\operatorname{sh}2f}$$

وأخيراً بمكاملة 'c بعد استبدال a و b بقيمتيهما

$$c = \frac{1}{2}\operatorname{Ln}\operatorname{sh}2f + \frac{A^2}{2}\coth 2f - \operatorname{Ln}B$$

A و B ثابتتان.

وضع هذه المقادير في (8) يعطينا الدالة التحليلية لـ ρ:

$$\rho = \frac{B}{\sqrt{\operatorname{sh}2f}}\, e^{-\left[\frac{\xi^2}{2}\coth 2f + \frac{A\xi}{\operatorname{sh}2f} + \frac{A^2}{2}\coth 2f\right]} \qquad (8)'$$

نحدد قيمة الثابتتين A و B بمقارنة هذا الحل مع الحل (7) عندما تتناهى f إلى الصفر (حالة التوازن)

لنجد أن

$$A = -\xi' \quad , \quad B = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar}}$$

نضعهما في '(8) ونعود إلى الإحداثيات q فنكتب

$$\rho = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\operatorname{sh}(\hbar\omega\beta)}}\, e^{-\frac{m\omega}{2\hbar\operatorname{sh}(\hbar\omega\beta)}\left[(q^2 + q'^2)\operatorname{ch}(\hbar\omega\beta) - 2qq'\right]} \qquad (8)''$$

التي تعطينا في حالة تطابق الإحداثيتين

$$\rho(q, q; \beta) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\operatorname{sh}(\hbar\omega\beta)}}\, e^{-\frac{m\omega}{\hbar}q^2 \operatorname{th}\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2}\right)} \qquad (9)$$

أي احتمال وجود النظمة في النقطة q.

إنها النتيجة التي حصلنا عليها في ((1.(3.21)) حيث الإحداثيات q هناك هي الإحداثيات النظامية $\sqrt{m}\, q$ ولذا لا تظهر فيها الكتلة.

2.1- النشر الاضطرابي لمؤثر الكثافة

سنكتب كما فعلنا في دراسة الاضطرابات في ميكانيك الكم الهاميلتوني على شكل مجموع هاميلتونيين

$$H = H_0 + H'$$

ومؤثر الكثافة على غرار مؤثر التطور على الشكل

$$\rho = \rho_0 \rho' \qquad (1.3)$$

حيث $\rho_0 = e^{-\beta H_0}$، في حال التوزع القانوني و $\rho_0 = e^{-\beta(H_0 - \mu N)}$، في حال التوزع القانوني الكبير؛ ρ_0 هو مؤثر الكثافة قبل الاضطراب (في حالة التوازن) و $\rho_0(0) = I$.

تأخذ معادلة بلوخ، عند وضع الصيغة (1.3) لـ ρ والهامياتوني $H = H_0 + H'$، الشكل التالي

$$\frac{\partial \rho_0}{\partial \beta}\rho' + \rho_0 \frac{\partial \rho'}{\partial \beta} + (H_0 + H')\rho_0\rho' = 0$$

وبما أن

$$\frac{\partial \rho_0}{\partial \beta} + H_0\rho_0 = 0$$

فإن

$$\frac{\partial \rho'}{\partial \beta} + \rho_0^{-1} H' \rho_0 \rho' = 0 \qquad (1.4)$$

أو، بإعطاء H' صيغة التمثيل الوسطي، انظر (IV.8.§5) مع الملاحظة أن مؤثر الكثافة ذاتي الترافق وليس واحدياً على خلاف U

$$H_I = \rho_0^{-1} H' \rho_0 \qquad (1.5)$$

$$\frac{\partial \rho'}{\partial \beta} + H_I \rho' = 0 \qquad (1.6)$$

نحصل على حل صوري لهذه المعادلة، كما فعلنا في حالة مؤثر التطور حيث يقابل الزمن t_0 مقلوب درجة الحرارة $\beta = 0$،

$$\rho'(\beta) = I + \sum_{n=1}^{\infty} \rho'^{(n)}(\beta) \qquad (1.7)$$

$$\rho'^{(n)}(\beta) = (-1)^n \int_0^{\beta}\int_0^{\beta_{n-1}} d\beta_1 \ldots d\beta_n H_I(\beta_1)\ldots H_I(\beta_n) \qquad (1.8)$$

$$\beta > \beta_1 \ldots > \beta_{n-1} > 0$$

إن العلاقتين اللتين يحققهما مؤثر التطور هما

$U(t, t_0) = U(t, t')U(t', t_0)$ و $U^{\dagger}(t_0, t) = U(t, t_0)$

علاقة الواحدية الناتجة عن العلاقة الأولى بوضع $t = t_0$: $U(t_0, t_0) = I$، تقابلهما العلاقتان

$$\rho^{-1}(\beta) = \rho(-\beta) \qquad (1.9)$$

$$\rho(\beta-\beta_1)=\rho(\beta)\rho(-\beta)=\rho(\beta)\rho^{-1}(\beta_1) \quad (1.10)$$

للحصول على النشر ρ_0 بعد ضربها بـ (1.8) الناتجتان عن تعريف ρ ذاتي الترافق، مما يتيح لنا كتابة الاضطرابي لمؤثر الكثافة الكلي بدليل هاميلتوني الاضطراب H' كما يلي

$$\rho^{(n)}(\beta)=\rho_0(\beta)\rho'^{(n)}(\beta)=(-1)^n\int_0^{\beta}d\beta_1\ldots\int_0^{\beta_{n-1}}\rho_0(\beta-\beta_1)H'(\beta_1)\rho_0(\beta_1-\beta_2)H'(\beta_2)\ldots H'(\beta_n)\rho_0(\beta_n-0) \quad (1.11)$$

$$\beta>\beta_1\ldots>\beta_{n-1}>0$$

أو عندما نكتفي بالحد الأول في الاضطراب

$$\rho=\rho_0\rho'(\beta)=\rho_0-\int_0^{\beta}d\beta_1\rho_0(\beta-\beta_1)H'(\beta_1)\rho_0(\beta_1)\rho'(\beta_1) \quad (1.11)'$$

الذي يأخذ الشكل التالي، عندما نفترض الاضطراب ρ' صغيراً أمام ρ_0، أي $\rho'=I$،

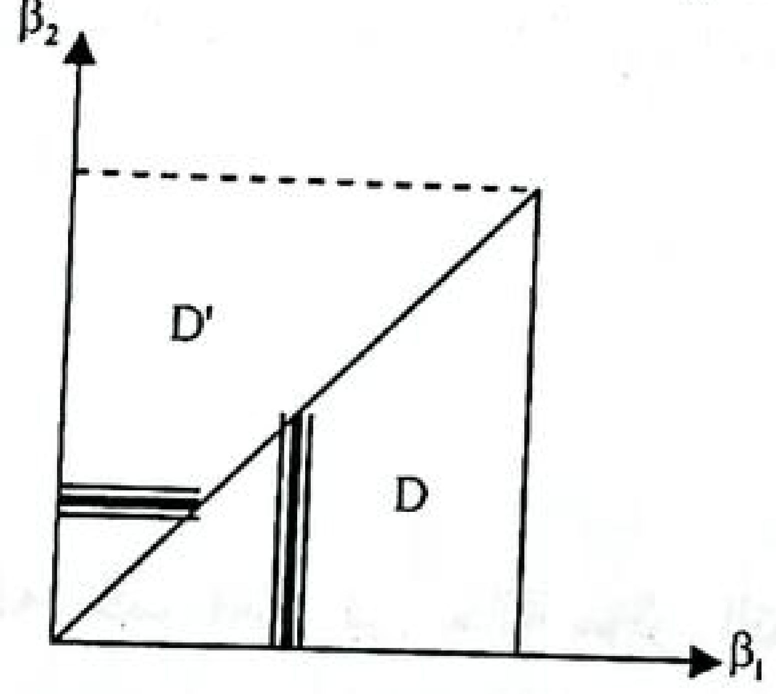
$$\rho\cong\rho_0-\int_0^{\beta}\rho_0(\beta-\beta_1)H'(\beta_1)\rho_0(\beta_1)d\beta_1 \quad (1.11)''$$

لننظر الآن إلى التكامل الثنائي التالي

$$I_2=\int_0^{\beta}d\beta_1\int_0^{\beta_1}d\beta_2\, f(\beta_1)f(\beta_2) \quad (1)$$

إن منطقة التكامل هي سطح المثلث متساوي الساقين الذي نرمز له بـ D، الشكل.1، وهو نصف المربع ذي الضلع β المقام على المتغيرين β_1 و β_2 أي أن

$$I_2=\frac{1}{2}\int_0^{\beta}d\beta_1\int_0^{\beta}d\beta_2 f(\beta_1)f(\beta_2) \quad (2)$$



الشكل.1

إن تمديد منطقة التكامل إلى السطح 'D يعني أننا بادلنا المتغيرين β_1 و β_2 وبادلنا معهما ترتيب الدالتين $f(\beta_1)$ و $f(\beta_2)$ وضربنا بالتالي التكامل (1) بـ 2. نعمم هذه الملاحظة من أجل كل المتغيرات β_i، $i=1,2,\ldots,n$، بتمديد مجال تكامل كل منها إلى β عوضاً عن β_{i-1} الذي يعني ضرب التكامل بعدد تبديلات n : $n!$ وكتابة التكامل

$$I_n=\int_0^{\beta}\ldots\int_0^{\beta_{n-1}}d\beta_1\ldots d\beta_n f(\beta_1)\ldots f(\beta_n)=\frac{1}{n!}\int_0^{\beta}\ldots\int_0^{\beta}d\beta_1\ldots d\beta_n f(\beta_1)\ldots f(\beta_n) \quad (3)$$

لن تبادل المؤثرات في (1.8)، وهي غير تبادلية أصلاً، لأنها مرتبة ترتيباً طبيعياً من درجات الحرارة المرتفعة $\beta = 0$ إلى درجات الحرارة المنخفضة كما رتبنا مؤثر التطور ترتيباً زمنياً من t_0 إلى أزمنة تليه $\ldots t_2 > t_1 > t_0$ نرمز لمؤثر الترتيب "الزمني" بـ T ونكتب (1.8)، آخذين (3) بعين الاعتبار، على الشكل

$$\rho'^{(n)}(\beta) = \frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\beta \ldots \int_0^\beta d\beta_1 \ldots d\beta_n T\left(H_1(\beta_1)\ldots H_1(\beta_n)\right) \qquad (1.8)'$$

نضع هذا المقدار في (1.7) ونكتب الصيغة العامة للنشر الاضطرابي لـ $\rho'(\beta)$ على الشكل

$$\rho'(\beta) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\beta \ldots \int_0^\beta d\beta_1 \ldots d\beta_n T\left(H_1(\beta_1)\ldots H_1(\beta_n)\right) = Te^{-\int_0^\beta H_1(\beta_1)d\beta_1} \qquad (1.12)$$

يبقى أن نحدد دالة التجزئة، التي نكتبها في التوزع القانوني الكبير على الشكل

$$Z = Tr\rho = Tre^{-\beta(H_0 - \mu N)}e^{-\beta H'}$$

إن $e^{-\beta(H_0 - \mu N)}$ هو $\rho_0 Z_0$ و $\rho' = e^{-\beta H'}$، لذا فإن

$$Z = Z_0 Tr\rho_0\rho' = Z_0\langle\rho'\rangle_0$$

وضعنا "0" لنشير إلى حساب القيمة الوسطية للمؤثر ρ' بدليل مؤثر الكثافة ρ_0 المستقل عن الاضطراب، لدينا من $(1.8)'$

$$\frac{Z}{Z_0} = Tr\rho_0\rho' = Tr\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\rho_0\int_0^\beta d\beta_1 \ldots d\beta_n T\left(H_1(\beta_1)\ldots H_1(\beta_n)\right)$$

ونظراً لجمعية أثر المصفوفات

$$= \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\beta Tr\rho_0(\beta)T\left(H_1(\beta_1)\ldots H_1(\beta_n)\right)d\beta_1 \ldots d\beta_n$$

والعنصر تحت إشارة التكامل هو تعريفاً القيمة الوسطية لجداء الهاميلتونيات المرتبة "زمنياً" عندما يكون مؤثر الكثافة ρ_0

$$\frac{Z}{Z_0} = Tr\rho_0\rho' = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\beta \left\langle TH_1(\beta_1)\ldots H_1(\beta_n)\right\rangle_0 d\beta_1 \ldots d\beta_n \qquad (1.13)$$

ولدينا كما في (1.12)

$$\frac{Z}{Z_0} = e^{-\int_0^\beta \langle TH_1(\beta_1)d\beta_1\rangle_0} \qquad (1.13)'$$

ونكتبها رمزياً على الشكل

$$\frac{Z}{Z_0} = Te^{-\int_0^\beta Tr\rho_0 H_1(\beta_1)d\beta_1} \qquad (1.13)''$$

3.1- النشر الاضطرابي لطاقة هيلمهولتز الحرة

لنتوقف في نشر ρ في (1.11) عند الحد الثاني ولنكتب دالة التجزئة بدليل الطاقة الحرة F

$$Z = e^{-\beta F} = Tr\rho = e^{-\beta F_0} - \int_0^\beta Tre^{-(\beta-\beta_1)H_0}H'(\beta_1)e^{-\beta_1 H_0}d\beta_1 + \int_0^\beta\int_0^{\beta_1} Tre^{-(\beta-\beta_1)H_0}H'(\beta_1)e^{-(\beta_1-\beta_2)H_0}H'(\beta_2)e^{-\beta_2 H_0}d\beta_1 d\beta_2 \quad (1.14)$$

نريد كتابة دالة التجزئة هذه بدليل عناصر مصفوفة هاميلتوني الاضطراب H' المأخوذة في نظمة متجهات الهاميلتوني H_0 الخاصة، التي نرمز لها بـ $\langle n|$، نفترض عدم تبعية H' لدرجة الحرارة، لا يتبع إلا الوضع : $H'_x(\beta) = H'(x)$. نستبدل في التكامل الثنائي $d\beta_1 d\beta_2$ بـ $dw d\beta_2$ حيث $[0, \beta] \rightarrow w = \beta_1 - \beta_2$ ونكتب التكامل الثنائي من الشكل (1) أعلاه على الشكل (2). تصبح (1.14) على الشكل

$$e^{-\beta F} = e^{-\beta F_0} - \beta Tr\left(e^{-\beta H_0}H'\right) + \frac{\beta}{2}\int_0^\beta dw Tr\left(e^{-\beta H_0}e^{wH_0}H'e^{-wH_0}H'\right) \quad (1.14)'$$

حيث نظمنا المقادير الأسية بـ H_0 لأن الأثر Tr دواري لكن

$$Tre^{-\beta H_0}H' = \sum_n \langle n|e^{-\beta H_0}H'|n\rangle = \sum_n e^{-\beta E_n}H'_{nn}$$

و

$$Tre^{-\beta H_0}e^{wH_0}H'e^{-wH_0}H' = \sum_{n,m}\langle n|e^{-\beta H_0}e^{wH_0}H'|m\rangle\langle m|e^{-wH_0}H'|n\rangle$$

$$= \sum_{n,m} e^{(-\beta+w)E_n}H'_{nm}e^{-wE_m}H'_{mn}$$

$$= \sum_{n,m} e^{-\beta E_n}e^{w(E_n-E_m)}\left|H'_{mn}\right|^2$$

وأخيراً $\frac{1}{E_n - E_m}$ ونحصل بعد المكاملة على w على

$$e^{-\beta F} = e^{-\beta F_0} - \sum_n \beta e^{-\beta E_n}H'_{nn} + \frac{\beta}{2}\sum_{n,m}\frac{e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}}{E_n - E_m}\left|H'_{nm}\right|^2 \quad (1.15)$$

الصالحة وضوحاً من أجل $n \neq m$ وتتناهى من أجل $n = m$ إلى $\beta e^{-\beta E_n}$:

$$\frac{e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}}{E_n - E_m} = e^{-\beta E_n}\frac{e^{\beta(E_n - E_m)} - 1}{E_n - E_m} = \beta e^{-\beta E_n}$$

يمكننا بنشر الطاقة الحرة F على شكل اضطرابي، 0 للحر، 1 للاضطراب من الرتبة الأولى، 2 من الرتبة الثانية، الخ...

$$F = F_0 + F_1 + F_2 + \ldots \quad (1)$$

ومطابقة حدي الاضطراب الأولين F_1 و F_2 مع حدود (1.15) بأن نكتب

$$e^{-\beta F} = e^{-\beta F_0} e^{-\beta(F_1+F_2+\dots)} = e^{-\beta F_0}\left[1 - \beta(F_1+F_2) + \frac{\beta^2}{2}(F_1+F_2)^2\right]$$

$$= e^{-\beta F_0}\left[1 - \beta F_1 + \frac{\beta^2}{2}F_1^2 - \beta F_2\right]$$

لنجد، بإهمال الحدود من الدرجة الثانية بـ F_2 : F_2^2 و F_1F_2، أن

$$F_1 = \frac{\sum_n e^{-\beta E_n} H'_{nn}}{e^{-\beta F_0}} = \frac{Tr\rho_0 H'}{z_0} = \langle H' \rangle_0 = \langle H' \rangle_{H_0} \qquad (1.16)$$

وبوضع هذه القيمة في الحد من الدرجة الثانية بـ F_1 والأولى بـ F_2 والمقارنة مع (1.15)

$$e^{-\beta F_0}\left(-\beta F_2 + \frac{\beta^2}{2}F_1^2\right) = \frac{\beta}{2}\sum_{n,m}\frac{e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}}{E_n - E_m}\left|H'_{nm}\right|^2$$

نجد أن

$$F_2 = \frac{\beta}{2}\left[\frac{\sum_n H'_{nm} e^{-\beta E_n}}{\sum_n e^{-\beta E_n}}\right]^2 - \frac{1}{2}\sum_{\substack{n,m\\ n\neq m}} e^{\beta F_0}\frac{e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}}{E_n - E_m}\left|H'_{nm}\right|^2 \qquad (1.17)$$

$$- \frac{\beta}{2}\sum_n e^{-\beta E_n}\left|H'_{nn}\right|^2 e^{\beta F_0}$$

نرى بالاعتماد على متراجحة كوشي–شفارتز[1]

$$\left|\sum_n a_n b_n\right|^2 \le \sum_n a_n^2 \sum_n b_n^2$$

أن

$$\left[\frac{\sum_n e^{-\beta E_n} H'_{nn}}{\sum_n e^{-\beta E_n}}\right] \le \frac{\sum_n e^{-\beta E_n}\left|H'_{nn}\right|^2}{\sum_n e^{-\beta E_n}}$$

وذلك بأخذ $a_n = \frac{e^{-\frac{1}{2}\beta E_n}}{\sum_n e^{-\beta E_n}}$ ، $\sum a_n^2 = \frac{1}{\sum_n e^{-\beta E_n}}$ ؛ $b_n = e^{-\frac{1}{2}\beta E_n} H_{nn}$

ومنه

$$F_2 \le -\frac{1}{2}\sum_{\substack{n,m\\ n\neq m}} e^{\beta F_0}\frac{e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}}{E_n - E_m}\left|H'_{nm}\right|^2 \le 0 \qquad (1.18)$$

---

[1] برهنا هذه المتراجحة في (((IV.(5.(1.2 انطلاقاً من المساواة

$$\left|\sum_n a_n b_n\right|^2 = \sum_n a_n^2 \sum_n b_n^2 - \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n}(a_i b_j - a_j b_i)^2$$

التي نبرهنها بالتكرار انطلاقاً من صيغتها المحققة من أجل $n = 2$.

نستطيع إذا ما جعلنا هاميلتوني الاضطراب تابعاً لوسيط، $\lambda \in [0, 1]$ وكتبنا الهاميلتوني الكلي على الشكل $H = H_0 + \lambda H'$، أي أدخلنا الاضطراب بشكل كظوم – ببطء حسب المفهوم الجهري للكلمة –، مطابقة حدود نشر الطاقة الحرة مع مشتقاتها بالنسبة لـ λ :

$$F = F(\lambda) = F_0 + \lambda F_1 + \lambda^2 F_2 + ... \qquad (2)$$

لدينا من أجل λ صغيراً والنشر في جوار $\lambda = 0$

$$F(\lambda) = F(0) + \lambda F'(0) + \frac{\lambda^2}{2} F''(0) + ... \qquad (2)'$$

$F(0) = F_0$ و $F(1) = F$.

يرينا هذا النشر أن $F_1 = F'(0)$ و $F_2 = \frac{1}{2} F''(0)$، وبالتالي، بالمقارنة مع (1.18)، أن $F''(0) \leq 0$ وهو ما يتفق مع ما نعرفه في الترموديناميك التقليدي من بلوغ الكمون الترموديناميكي حده الأدنى عند وقوع التوازن. ولكن هل يبقى هذا صحيحاً خارج حالة التوازن ؟

__قضية 1__ :

إن الدالة F دالة محدبة تقع بكاملها تحت مماسها في النقطة $\lambda = 0$

$$F \leq F_0 + \langle H' \rangle_0 = F_0 + \langle H' \rangle_{H_0} \qquad (1.19)$$

لننشر $F(\lambda)$ في جوار نقطة ما $\alpha \in [0, 1]$ كما في (2) و'(2)، لدينا من جهة،

$$F(\alpha + \gamma) = F_0(\alpha) + \gamma F_1(\alpha) + \gamma^2 F_2(\alpha) + ...$$

ومن جهة أخرى،

$$= F(\alpha) + \gamma F'(\alpha) + \frac{\gamma^2}{2} F''(\alpha) + ...$$

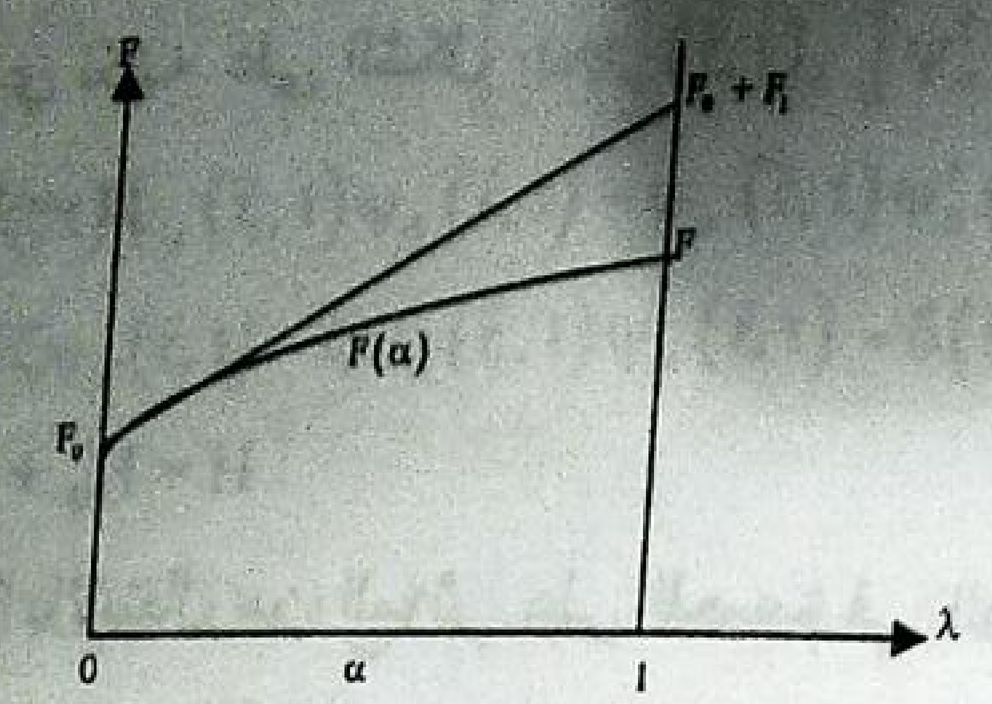
إن $F(\alpha) = F_0(\alpha)$ لأن $H = H_0 + \alpha H'$ و $\gamma F_1(\alpha)$ و $\gamma^2 F_2(\alpha)$ هما F_1 و F_2 في(1) ويحققان (1.16) و(1.18)؛ وهكذا فإن

$$F''(\alpha) = 2F_2(\alpha) \leq 0$$ ، أياً كانت قيمة الوسيط α

والدالة F محدبة وبالتالي فإن

$$F \leq F_0 + F_1 = F_0 + \langle H' \rangle_0$$

نظراً لـ (1.16) والدالة F واقعة تحت المماس في النقطة $\lambda = 0$ (أو $\alpha = 0$) ذي المعادلة $F(0) + \lambda F'(0)$، الشكل.2



الشكل.2

لنلاحظ أنه يمكن النظر إلى F_0 كطاقة مضطربة مقابلة للهاميلتوني $H - H'$ نحصل عليها من الطاقة "الحرة" F ذات الهاميلتوني H ونكتبها كما في (1.19)

$$F_0 \leq F + \langle -H' \rangle_H \qquad (1.19)'$$

بحيث يمكن كتابة F من هاتين العلاقتين على الشكل

$$F_0 + \langle H' \rangle_H \leq F \leq F_0 + \langle H' \rangle \qquad (1.20)$$

2. دالات غرين

1.2- دالة غرين لنظمة جهرية

كتبنا في التكميم الثاني، حيث أضحت دالات الموجة مؤثرات، المؤثر عدد الجسيمات على الشكل (IV.(6.(2.7)))

$$N = \int_V \psi^\dagger(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t)d\vec{r} \qquad (2.1)$$

حيث V الحجم الجهري الذي تحتله الجسيمات. سندل هنا على حالة الجسيم في الوضع $\vec{r}$ واللحظة t والحالة الكمومية α (السبين، الطاقة، الخ) بالمؤثر $\psi_\alpha(\vec{r}, t)$. نحصل على هذا المؤثر التابع للزمن (تمثيل هايزنبرغ) من المؤثر المستقل عنه (تمثيل شرودينغر) على نفس النحو الذي حصلنا فيه على العلاقة بين دالتي الموجة في هذين التمثيلين

$$\begin{cases} \psi_\alpha(\vec{r}, t) = e^{iHt}\psi_\alpha(\vec{r})e^{-iHt} \\ \psi^\dagger_\alpha(\vec{r}, t) = e^{iHt}\psi^\dagger_\alpha(\vec{r})e^{-iHt} \end{cases} \qquad (2.2)$$

حيث H الهاميلتوني الكلي للنظمة الجهرية المؤلف من الهاميلتوني الحر في التوزع القانوني الكبير H_0'

$$H_0' = H_0 - \mu N \qquad (2.3)$$

ومن هاميلتوني التفاعل H' الذي نكتبه على الشكل

$$H' = V^{(1)} + V^{(2)} + \dots \tag{2.4}$$

و

$$H = H'_0 + V^{(1)} + V^{(2)} + \dots \tag{2.5}$$

نستعمل العلاقات التي تسمح لنا بالانتقال من المؤثر على الجسيم في الفضاء الهيلبرتي $\mathscr{H}$ إلى المؤثر على عدد من الجسيمات في الفضاء $\mathscr{H}^{\otimes N}$ التي درسناها في ((IV.(6(§3))، وعلى وجه التحديد العلاقتين (3.16) و(3.21) في هذه الفقرة، فنكتب

$$H'_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\int \psi^{\dagger}_{\alpha}(\bar{r},t)\nabla^2\psi_{\alpha}(\bar{r},t)d\bar{r} - \mu N \tag{2.6}$$

$$V^{(1)} = \int \psi^{\dagger}_{\alpha}(\bar{r},t)U^{(1)}(\bar{r})\psi_{\alpha}(\bar{r},t)d\bar{r} \tag{2.7}$$

تعبر هاتان العلاقتان عن هاميلتوني الجسيم الخاضع لحقل خارجي $U^{(1)}(r)$ وتقابلان (3.16). أما

$$V^{(2)} = \frac{1}{2}\int \psi^{\dagger}_{\beta}(\bar{r},t)\psi^{\dagger}_{\alpha}(\bar{r}',t)U^{(2)}(\bar{r}-\bar{r}')\psi_{\alpha}(\bar{r}',t)\psi_{\beta}(\bar{r},t)d\bar{r}_1 d\bar{r}_2 \tag{2.8}$$

فتعبر عن تفاعل الجسيمات زوجاً زوجاً، عن التصادم زوجاً زوجاً وتقابل (3.21) في الفقرة المذكورة. تعبر الحدود الأخرى $V^{(3)}$، $V^{(4)}$... في نشر هاميلتوني التفاعل عن التفاعل بين ثلاثة جسيمات، أربعة جسيمات...

يخضع المؤثر $\psi_{\alpha}(\bar{r},t)$ إلى نفس علاقات المبادلة التي يخضع لها مؤثرا الإحداث والفناء في تمثيل شرودينغر. لدينا

$$\begin{cases} \left[\psi_{\alpha}(\bar{r},t), \psi^{\dagger}_{\beta}(\bar{r}',t)\right]_{-\zeta} = \delta_{\alpha\beta}\delta(\bar{r}-\bar{r}') \\ \left[\psi_{\alpha}(\bar{r},t), \psi_{\beta}(\bar{r}',t)\right]_{-\zeta} = 0 \\ \left[\psi^{\dagger}_{\alpha}(\bar{r},t), \psi^{\dagger}_{\beta}(\bar{r}',t)\right]_{-\zeta} = 0 \end{cases} \tag{2.9}$$

حيث $\zeta = \pm$ من أجل المبادل أو المبادل المضاد على الترتيب : من أجل البوزونات أو الفيرميونات.

يخضع المؤثر $\psi_{\alpha}(\bar{r},t)$ ككل مؤثر تابع للزمن إلى العلاقة

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi_{\alpha}(\bar{r},t)}{\partial t} = \left[H, \psi_{\alpha}(\bar{r},t)\right] \tag{2.10}$$

التي نكتبها على شكل معادلة شرودينغر مستعينين بنشر H'، بعلاقات المبادلة وبـ (2.1) على الشكل

$$i\hbar\frac{\partial\psi_{\alpha}(\bar{r},t)}{\partial t} = \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu - U^{(1)}(\bar{r})\right)\psi_{\alpha}(\bar{r},t) + \left(\int \psi^{\dagger}_{\beta}(\bar{r}',t)U^{(2)}(\bar{r}-\bar{r}')\psi_{\beta}(\bar{r},t)d\bar{r}'\right)\cdot\psi_{\alpha}(\bar{r},t) + \dots \tag{2.11}$$

حيث تخلصنا من دالات ديراك في (2.9) بإجراء التكامل : لدينا، على سبيل المثال، عندما نأخذ في المبادل $[\psi_{\alpha}, H]$ الحد $[\psi_{\alpha}, -\mu N]$ فنكتبه بدليل (2.1) و(2.9)

$$\left[-\mu\psi_\alpha(\bar{r},t),\ \int \psi_\alpha^\dagger(\bar{r}_1,t)\psi_\alpha(\bar{r}_1,t)d\bar{r}_1\right]$$

$$=\mu\int\left[\psi_\alpha^\dagger(\bar{r}_1,t)\psi_\alpha(\bar{r}_1,t)\psi_\alpha(\bar{r},t)-\psi_\alpha(\bar{r},t)\psi_\alpha^\dagger(\bar{r}_1,t)\psi_\alpha(\bar{r}_1,t)\right]d\bar{r}_1$$

$$=\mu\int\left[\psi_\alpha^\dagger(\bar{r}_1,t)\zeta\psi_\alpha(\bar{r},t)-\zeta\psi_\alpha^\dagger(\bar{r}_1,t)\psi_\alpha(\bar{r},t)-\delta(\bar{r}-\bar{r}_1)\right]\psi_\alpha(\bar{r}_1,t)dr_1$$

$$=-\mu\psi_\alpha(\bar{r},t)$$

عرفنا دالة غرين بمناسبات عديدة كسعة إحداث جسيم في لحظة معينة أو نقطة معينة وفناءه في لحظة لاحقة أو نقطة أخرى. سنعمم هذا التعريف هنا إلى سعة إحداث جسيم في نقطة ولحظة معينتين t_2، r_2 وفناءه في نقطة أخرى ولحظة لاحقة (r_1, t_1). نرمز للمتغيرين $\bar{r}$، t بـ $x = x^0, \bar{x}$ وإن لم يكن لهذا الرمز صلة بالنظرية الكمومية النسبية.

<u>تعريف 1 :</u>

نعرف دالة غرين لنظمة جهرية بالعلاقة

$$G_{\alpha\beta}(x_1, x_2) = -i\left\langle T\psi_\alpha(x_1)\psi_\beta^\dagger(x_2)\right\rangle \tag{2.12}$$

حيث رمزنا اختصاراً بـ $\langle\ \rangle$ للقيمة الوسطية بالنسبة لحالة القاع أي في الصفر المطلق وبـ T للتعبير عن التسلسل الزماني، إذ لا معنى لهذه العلاقة إلا إذا وقع الفناء بعد الإحداث. لذا نكتب دالة غرين على الشكل

$$G_{\alpha\beta}(x_1, x_2) = \begin{cases} -i\left\langle \psi_\alpha(x_1)\psi_\beta^\dagger(x_2)\right\rangle & t_1 > t_2 \\ -i\zeta\left\langle \psi_\beta^\dagger(x_2)\psi_\alpha(x_1)\right\rangle & t_1 < t_2 \end{cases} \quad \text{من أجل} \tag{2.13}$$

سنركز انتباهنا على حالة الفيرميون حيث تختلف الإشارة بين $t_1 < t_2$ و $t_1 > t_2$.

لنلاحظ أنه عندما ترمز الحالة الكمومية، الدليل α، β،...، إلى السبين وعندما لا تتفاعل السبينات، أي عندما لا تتوقف حالة النظمة الجهرية على السبين، وهذا هو حال كل النظمات المعزولة (غير الخاضعة إلى حقل خارجي) والنظمات التي لا تتمتع بخاصة المغنطيسية الحديدية، فإن المصفوفة $G_{\alpha\beta}$ تختزل إلى المصفوفة الوحدة

$$G_{\alpha\beta}(x_1, x_2) = \delta_{\alpha\beta} G(x_1, x_2)$$

لنلاحظ كذلك أن دالة غرين المعرفة هنا، ككل الدالات التي اعترضتنا، تابعة في حال النظمة الجهرية المتجانسة[1] إلى $\bar{r}_1 - \bar{r}_2$ نظراً لتناحي المكان، وطبعاً لـ $t_1 - t_2$ نظراً لتجانس الزمان وبالتالي فإن

$$G(x_1, x_2) = G(x_1 - x_2) \tag{2.14}$$

---

[1] نقصد بالتجانس هنا التجانس على المستويين الجهري والمجهري، أي تجانس كثافة احتمال وجود الجسيم في الفضاء، في نقاط الحجم الذي تحتله النظمة، فالسوائل، الغازات والموائع متجانسة ولكن بلورات الأجسام الصلبة غير متجانسة.

2.2- مصفوفة الكثافة

تعريف 2 :

نعرف عناصر مصفوفة الكثافة لجسيم من النظمة الجهرية بالقيمة الوسطية الجهرية المنظمة للواحد

$$\rho_{\alpha\beta}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{N}\left\langle \psi_\beta^\dagger(\vec{r}_2, t)\psi_\alpha(\vec{r}_1, t)\right\rangle \quad (2.15)$$

إن عنصر مؤثر الكثافة في $\mathscr{H}$ المكتوب بشكل تحليلي هو

$$\rho_{\alpha\beta}^{(1)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = p_{\alpha\beta} i(\vec{r}_1)\overline{i_\beta(\vec{r}_2)}$$

يقابل جداء الدالتين عندما ننتقل من الفضاء $\mathscr{H}$ إلى الفضاء $\mathscr{H}^{\otimes N}$ الذي يفعل فيه المؤثر ρ جداء المؤثرين $\psi_\beta^\dagger(\vec{r}_2)\psi_\alpha(\vec{r}_1)$ انظر العلاقتين (((IV.(6.(3.9,9") وهو ما يبرر التعريف أعلاه.

يمكننا بمعرفة مؤثر الكثافة في $\mathscr{H}^{\otimes N}$ حساب القيمة الوسطية لأي مقدار فيزيائي لأي مؤثر A يفعل في $\mathscr{H}^{\otimes N}$ انطلاقاً من المؤثر $A^{(1)}$ الفاعل في $\mathscr{H}$:

$$A_{\alpha\beta} = \sum_N A_{\alpha\beta}^{(1)}$$

وجدنا في (((IV.(6.(3.12) أن

$$A_{\alpha\beta}(t) = \int \psi_\alpha^\dagger(t, \vec{r}_1) A_{\alpha\beta}^{(1)} \psi_\beta(t, \vec{r}_1) d\vec{r}_1$$

والقيمة الوسطية لـ A هي

$$\langle A\rangle = \sum_{\alpha\beta}\left\langle A_{\alpha\beta}(t)\right\rangle = N\sum_{\alpha\beta}\left\langle A_{\alpha\beta}^{(1)}\right\rangle = \sum_{\alpha\beta}\int\left\langle \psi_\alpha^\dagger(t, \vec{r}_1) A_{\alpha\beta}^{(1)} \psi_\beta(t, \vec{r}_1)\right\rangle d\vec{r}_1$$

لا يفعل المؤثر على الجسيم $A^{(1)}$، إلا في نقطة وجود الجسيم ولتكن $\vec{r}_1$؛ فالقيمة الوسطية تحت إشارة التكامل هي الجداء $NA_{\alpha\beta}^{(1)}\rho_{\beta\alpha}\big|_{\vec{r}_1=\vec{r}_2}$، والجمع على α و β هو أثر المصفوفة أي القيمة الوسطية لـ $A^{(1)}$ في النقطة $\vec{r}_1$ والتكامل هو إذاً $N\left\langle A^{(1)}\right\rangle$؛ ولدينا

$$\langle A\rangle = N\left\langle A^{(1)}\right\rangle = \int A_{\alpha\beta}^{(1)}\rho_{\beta\alpha}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\big|_{\vec{r}_1=\vec{r}_2} d\vec{r}_1 \quad (2.16)$$

يمكن التعبير عن مصفوفة الكثافة بدليل دالة غرين (2.13) غير المعرفة في اللحظة $t_1 = t_2$ لذا نكتب

$$\rho_{\alpha\beta}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\frac{i}{N} G(t, \vec{r}_1; t_1 + 0, \vec{r}_2) \quad (2.17)$$

نقصد بالكتابة $t_1 + 0$، كما فعلنا غالباً تناهي t_2 إلى t_1 من الأعلى.

عندما تكون النظمة الجهرية متجانسة على المستوى المجهري أيضاً والمصفوفة G مختزلة إلى المصفوفة الوحدة فإن $\rho_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}\rho$ و

$$\rho(\vec{r}) = -\frac{i}{N} G(t = 0, \vec{r}) \quad (2.18)$$

لدينا من (2.15)، في حالة السبين $\frac{1}{2}$ و $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$،

$$\left\langle \psi_\alpha^\dagger\psi_\alpha\right\rangle + \left\langle \psi_\beta^\dagger\psi_\beta\right\rangle = 2N\rho(0)$$

ولكن الطرف الأيسر ليس سوى مؤثر كثافة الفيرميونات في النظمة الجهرية ويساوي $\frac{N}{V}$، ومنه

$$\frac{N}{V} = 2N\rho(0) = -2iG\left(t = -0, \vec{O}\right) \qquad (2.19)$$

يعين محول فوريي لمؤثر الكثافة توزع الاندفاع للجسيمات؛ لدينا عدد الجسيمات ذات الاندفاع $p = \hbar\vec{k}$ في واحدة الحجوم $\frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}$

$$N(\vec{p}) = N\int \rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{-i\vec{k}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} d(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

$\vec{r}_1 - \vec{r}_2 = \vec{r}$

$$= -i\int G(t, \vec{r})_{t=-0} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} d\vec{r} \qquad (2.20)$$

نكتب محول فوريي لـ $G(x)$، أي $G(t, \vec{r})$ على الشكل الذي استعملناه في المجلد السابق حيث يقابل الإحداثيات $x = x^0, x$ الإحداثيات في الفضاء الثنوي، $E, \vec{p}$ أي $\hbar k$ و $\hbar\omega$ أو $\left(k^0, \vec{k}\right)$

$$G(x) = \frac{1}{(2\pi)^4}\int G\left(k^0, \vec{k}\right) e^{-ikx} dk$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^4}\int G\left(k^0, \vec{k}\right) e^{-i\left(k^0 t - \vec{k}\cdot\vec{r}\right)} dk_0 d\vec{k} \qquad (2.21)$$

و

$$G\left(k^0, \vec{k}\right) = \int G(t, \vec{r}) e^{i\left(k^0 t - \vec{k}\cdot\vec{r}\right)} dt d\vec{r} \qquad (2.22)$$

ومنه بوضع (2.21) في (2.20)

$$N(\vec{p}) = N\left(\vec{k}\right) = -i\lim_{t\to -0}\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} G\left(k_0, \vec{k}\right) e^{-ik^0 t} dk^0 \qquad (2.23)$$

حيث أعطى التكامل على $d\vec{r}$ دالة ديراك $\delta\left(\vec{k}' - \vec{k}\right)$ والتكامل على $d\vec{k}'$ في (2.21) $G\left(k_0, \vec{k}\right)$ ولم يبق إلا التكامل على dk^0.

لنلاحظ أننا عندما نعتمد نظمة وحدات تأخذ فيها $\hbar$ القيمة 1 فإن $\vec{k} \equiv \vec{p}$ و $k^0 \equiv E \equiv \omega$. لذا نكتب في كثير من الأحيان $G(\omega, \vec{p})$ عوضاً عن $G\left(k_0, \vec{k}\right)$ في كل مرة نفرض فيها $\hbar = 1$.

ننظم $N(\vec{p})$ بكتابة (2.19) بمحول فوريي لـ $G\left(t = -0, \vec{O}\right)$

$$\frac{N}{V} = -2i\lim_{t\to -0}\frac{1}{(2\pi)^4}\int G\left(k_0, \vec{k}\right) e^{-ik^0 t} dk \qquad (2.24)$$

$dk = dk_0 d\vec{k}$

الذي يعطينا بالمقارنة مع مكاملة طرفي (2.23) على $d\vec{k}$

$$\frac{2}{(2\pi)^3}\int N(\vec{p}) d\vec{k} = \frac{N}{V} \qquad (2.24)'$$

وهو التنظيم الطبيعي : $2N(\vec{p})$ هو عدد الفيرميونات التي سبينها يساوي $\frac{1}{2}$ في واحدة الحجوم و $\frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}$ هو التنظيم لجسيم في واحدة الحجوم.

لنلاحظ أخيراً أن التكامل في (2.23) و(2.24) يكافئ أخذ دائر في المستوي العقدي لـ k^0 على شكل نصف دائرة في النصف العلوي يتناهى قطرها إلى اللانهاية وهو ما يسمح به وجود المعامل e^{-ik^0t} $t<0$ وحساب التكامل بطريقة البواقي.

لنتوقف قليلاً هنا للتذكير بما نعرفه عن دالة غرين بصورة عامة. فقد استعنا بها لحل المعادلات التفاضلية – معادلات دالة الموجة في ميكانيك الكم، أو معادلة كلاين–غوردن في ميكانيك الكم النسبوي، معادلة الموجة الكهرطيسية، الخ– فكتبنا المعادلة على الشكل

$$D\psi = V\psi \qquad (1)$$

حيث D مؤثر تفاضلي ∇^2، $\Box^2$، $\Box^2+m^2$، الخ. V الكمون الخارجي الفاعل في الجسيم وعرفنا دالة غرين بالقول إنها حل المعادلة بدون طرف ثان، أو على وجه التحديد إنها توزيعة غرين، حل المعادلة

$$D_x G = \delta(x) \qquad (2)$$

حيث $x=\vec{r}$ أو $x^0, \vec{x}$، الخ. لنجد أن حل المعادلة التفاضلية (1) بدليل دالة غرين هو من الشكل (IV.(8.(2.14)))

$$|\psi(\vec{r})\rangle = |\psi_0\rangle + \int G(\vec{r}-\vec{r}')V(r')|\psi(r')\rangle d\vec{r}' \qquad (3)$$

والتكامل تعريفاً هو جداء التلاف لدالة غرين، التابعة دوماً لـ $(\vec{r}-\vec{r}')$، بالطرف الثاني لـ (1)، أي متجهة حالة الموجة في النقطة $\vec{r}'$ تحت تأثير الكمون الخارجي في هذه النقطة. وهو ما يبين أن دالة غرين $G(\vec{r}-\vec{r}')$ تعبر عن المسار الحر للجسيم بين النقطتين $\vec{r}'$ و $\vec{r}$ بعد تصادمه (تبعثره) بجسيم آخر في النقطة r'.

تتيح المعادلة (2) تعيين محول فوريي لدالة غرين من أجل أي مؤثر تفاضلي D_x. لنأخذ أعم الحالات التي اعترضتنا $D_x = \Box_x^2 + m^2$؛ لدينا من جهة

$$G(x-x') = \frac{1}{(2\pi)^4}\int G(k)e^{-ik(x-x')}dk$$

$$D_x G(x-x^0) = \frac{1}{(2\pi)^4}\int G(k)\left(-k^{0^2}+\vec{k}^2+m^2\right)e^{ik(x-x')}dk \qquad (4)$$

ومنه، بمقارنة الطرفين الثانيين في (4) و(2) حيث $\delta = \frac{1}{(2\pi)^4}\int e^{ik(x-x')}dk$

$$G(k) = \frac{-1}{k^2-m^2} \qquad (5)$$

حيث $k^2 = k^{0^2} - \vec{k}^2$. لهذه الدالة قطب في النقطة $k^2 = m^2$ (في الفضاء رباعي الأبعاد) ولمحول فوريي للموجة الكهرطيسية $(m = 0)$ قطب في النقطة $k^2 = 0$. نكتب $G(k)$ لتعيين قيمته بحساب البواقي على الشكل

$$(6)\quad G(k) = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{-1}{\left(k^0 + i\varepsilon\right)^2 - \vec{k}^2 - m^2} = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{-1}{k^2 - m^2 \pm 2i\varepsilon k^0}$$

ونحصل على قيمتين ممكنتين لـ $G(x - x')$:

$$(7)\quad G_{\substack{ret\\av}}(x - x') = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{-1}{(2\pi)^4}\int\frac{e^{ik(x-x')}}{k^2 - m^2 \pm 2i\varepsilon k^2}dk$$

رمزنا بـ $G_{\substack{ret\\av}}$ من أجل إشارة $\pm$ في المخرج على الترتيب لأن $G_{ret} = 0$ من $x^0 < x'^0$ وهو ما سميناه الموجة المؤخرة (الكمون المؤخر) في الكهرطيسية و G_{av} من أجل $x^0 > x'^0$ وهو ما سميناه الموجة المسبقة (الكمون المسبق) وأشرنا إلى أن G_{av} تقابل في نظرية الحقول المكممة الجسيم المضاد: سهم الزمن يتجه في مخططات فاينمان من المستقبل نحو الماضي معاكساً الاتجاه الطبيعي لهذا السهم. نلاحظ أن الانقطاع في تعريف دالة غرين (2.13) من أجل $t_1 - t_2 = t = 0$ يكافئ وجود الشذوذ الممثل بقطبين في محول فوريي لهذه الدالة $k^0 \pm i0$.

3.2- تعين طيف الطاقة الفيرميونية بدليل دالة غرين

ننتقل من تمثيل شرودينغر إلى تمثيل هايزنبرغ في حالة الموجة المستقرة (لـ H'_0 متجهات خاصة $|n\rangle$ وقيم خاصة $(E_n - \mu N_n)$ وغياب التفاعل H' حسب (2.2) و(2.3) بالعلاقة

$$\langle n|\psi_\alpha(t,\vec{r})|m\rangle = e^{i(E_n - \mu N_n)t - i(E_m - \mu N_m)t} \quad (2.25)$$

$$= e^{i\omega_{nm}t}\langle n|\psi_\alpha(\vec{r})|m\rangle$$

حيث رمزنا لـ $E_n - E_m - \mu(N_n - N_m)$ بـ ω_{nm}، هذا من جهة، ومن جهة ثانية فإن المؤثر $\psi^\dagger(\vec{r})$ أو $\psi^\dagger(t,\vec{r})$ يزيد عدد الجسيمات بـ 1 و ψ ينقصها بـ 1 أي أن $N_n = N_m - 1$، ومنه

$$\omega_{nm} = E_n(N) - E_m(N+1) + \mu \quad (2.26)$$

نعين تابعية المؤثر للإحداثيات $\psi_\alpha(\vec{r})$ بأن نلاحظ أن الانسحاب الكلي للنظمة لا يغيرها نظراً لتجانسها ولكنه يغير إحداثيات المؤثر $\psi_\alpha(0)$ فتصبح، عندما نسحب النظمة ككل المقدار $-\vec{r}$، $\psi_\alpha(\vec{r})$. نعلم أن مولد مؤثر الانسحاب هو $\vec{p}$ وأن الانسحاب معطى بالعلاقة

$$T(-\vec{r}) = e^{-i\vec{r}\cdot\vec{p}}$$

حيث $\bar{p}$ مؤثر الاندفاع المتناسب مع $\bar{\nabla}$ وقيمه الخاصة p. نعلم من جهة أخرى أن انسحاب النظمة ككل هو انسحاب متجهة الحالة بالاتجاه المعاكس $|m\rangle_0 \to |m\rangle_r = e^{i\bar{r}\bar{p}}|m_0\rangle$ وأن المؤثر على $|m\rangle$، ψ يتغير حسب العلاقة $e^{i\bar{r}\bar{p}}\psi e^{-i\bar{r}\bar{p}}$ (انظر ((IV.3.(1.21)) وعليه فإن

$$\langle n|\psi_\alpha(0)|m\rangle = \langle n|e^{i\bar{r}\cdot\bar{p}}\psi_\alpha(\bar{r})e^{-i\bar{r}\cdot\bar{p}}|m\rangle$$

فإذا كان للنظمة اندفاعان محددان في الحالتين $|m\rangle$ و $\langle n|$، $\bar{p}_m$ و $\bar{p}_n$ على الترتيب، فإن

$$\langle n|\psi_\alpha(0)|m\rangle = e^{i\bar{k}_{nm}\cdot\bar{r}}\langle n|\psi_\alpha(r)|m\rangle \tag{2.27}$$

حيث $\bar{k}_{nm} = \bar{p}_n - \bar{p}_m$؛ وأخيراً فإن وضع قيمة الطرف الثاني من هذه المعادلة في (2.25) يرينا أن

$$\langle n|\psi_\alpha(t,\bar{r})|m\rangle = e^{i(\omega_{nm}t - \bar{k}_{nm}\bar{r})}\langle n|\psi_\alpha(0)|m\rangle \tag{2.28}$$

ونحصل على العلاقة التي يعينها المؤثر $\psi^{\dagger}_\alpha$ بتحويل السطور إلى أعمدة وأخذ المرافق العقدي كالمعتاد

$$\langle n|\psi^{\dagger}_\alpha(t,r)|m\rangle = \overline{\langle m|\psi(t,\bar{r})|n\rangle} \tag{2.28}^{\dagger}$$

يدفعنا وجود الانقطاع في تعريف دالة غرين من أجل $t=0$ والشذوذ الناتج عنه في محول فوريي لهذه الدالة إلى تقسيم التكامل في (2.22) إلى تكامل من أجل t في المجال $[-\infty, 0]$ وآخر في المجال $[0,\infty]$ ، $t = t_1 - t_2$، ننشر في هذه الحالة علاقة التعريف الأولى في (2.13) على النحو التالي

$$G(t,\bar{r}) = \frac{1}{2}G_{\alpha\alpha} = -\frac{1}{2}i\sum_m\langle 0|\psi_\alpha(x_1)|m\rangle\langle m|\psi^{\dagger}_\alpha(x_2)|0\rangle \tag{2.29}$$

وبأخذ العلاقتين السابقتين بعين الاعتبار

$$= -\frac{1}{2}i\sum_m e^{i(\omega_{0m}t + \bar{r}\cdot\bar{p}_m)}\left|\langle 0|\psi_\alpha(0)|m\rangle\right|^2$$

حيث، حسب (2.26)

$$\omega_{0m} = E_0(N) - E_m(N+1) + \mu$$

نضع هذا المقدار في (2.22) $\left[\bar{k} = \bar{p}\ ،k^0 = \omega\right]$، نكامل على $\bar{r}$ فنحصل على دالة ديراك $\delta(\bar{p} - \bar{p}_m)$ مضروبة بـ $(2\pi)^3$ ونكامل على t بعد إضافة حد $i0$ إلى الدالة الأسية بـ t لنضمن تناهيها إلى الصفر من أجل t متناهية في الكبر، فنحصل أخيراً على

$$\int G(t,r)e^{i(\omega t - \bar{p}\cdot\bar{r})}d\bar{r}dt = -\frac{1}{2}i(2\pi)^3\delta(\bar{p} - \bar{p}_m) \times \frac{1}{-i(\omega + \omega_{0m} + i0)} \times \left|\langle 0|\psi_\alpha(0)|m\rangle\right|^2$$

$$= \frac{1}{2}(2\pi)^3\frac{\left|\langle 0|\psi_\alpha(0)|m\rangle\right|^2\delta(\bar{p} - \bar{p}_m)}{\omega + \omega_{0m} + i0} \tag{2.30}$$

نحسب التكامل بين $[-\infty, 0]$ بنفس الطريقة، بنشر العلاقة الثانية في (2.13) لنجد عوضاً عن (2.29)

$$G(t,\bar{r}) = \frac{1}{2}i\sum_m\left|\langle m|\psi_\alpha(0)|0\rangle\right|^2 e^{i(\omega_{m0} - \bar{p}_m\cdot\bar{r})t}$$

حيث

$$\omega_{m0} = E_m(N-1) - E_0(N) + \mu$$

نضيف $i0$- لضمان تناهي الدالة الأسية إلى الصفر عندما تتناهى t إلى ∞- ونحصل أخيراً على محول فوريي لدالة غرين

$$G(\omega,\vec{p}) = \frac{1}{2}(2\pi)^3 \sum_m \left\{ \frac{|\langle 0|\psi_\alpha(0)|m\rangle|^2 \delta(\vec{p}-\vec{p}_m)}{\omega+\mu+E_0(N)-E_m(N+1)+i0} + \frac{|\langle m|\psi_\alpha(0)|0\rangle|^2 \delta(\vec{p}+\vec{p}_m)}{\omega+\mu+E_m(N-1)-E_0(N)-i0} \right\}$$

$(2.30)_F$

نرمز لطاقتي التحريض، الفرق بين مستويي طاقة النظمة المحرضة وعدد جسيمات فيها أكبر أو أصغر بواحد من عدد جسيمات طاقة القاع، بـ ε^+ أو ε^- على الترتيب :

$$\varepsilon_m^+ = E_m(N+1) - E_0(N)$$

$$\varepsilon_m^- = E_0(N) - E_m(N-1)$$

وضعنا الإشارتين $\pm$ لنشير أن $\varepsilon_m^+ > \mu$ و $\varepsilon_m^- < \mu$ ونبين ذلك على النحو التالي

إن الكمون الكيميائي تعريفاً هو $\frac{\partial E_0}{\partial N}$ نكتبه على شكل تقريبي:

$$\mu = E_0(N+1) - E_0(N)$$

و

$$\varepsilon_m^+ = E_m(N+1) - E_0(N+1) + E_0(N+1) - E_0(N)$$
$$\simeq \left[E_m(N+1) - E_0(N+1)\right] + \mu$$

و E_m أكبر من E_0 عندما يكون عدد الجسيمات هو نفسه في الحالتين حسب تعريف طاقة القاع وكذلك الأمر بالنسبة لـ ε^-.

أما مسألة القطب في حدي الطرف الثاني لمحول فوريي لدالة غرين، فقد وجدنا حلاً لها في نظرية التوزيعات وكتبنا (((IV.(5.(5.7)

$$\frac{d}{dx}\mathrm{Log}(x \pm i0) = \frac{1}{x \pm i0} = \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x)$$

وهكذا فإن القسم (Principal)[2] $P\frac{1}{x}$ على الشكل $\frac{1}{x}$ لذا نكتب هي القيمة الرئيسية لكوشي و $\int\frac{dx}{x}$ الحقيقي لـ (2.30) هو

---

[2] ونقصد بها التوزيعة "شبه الدالة" لأن تكاملها هو مع دالة منتظمة $\varphi \in D$ (انظر الفصل الخامس المشار إليه في مجلد الميكانيك الكمومي) ولدينا

$$\left\langle \varphi \middle| \frac{1}{x \pm i0} \right\rangle = \left\langle \varphi \middle| \frac{1}{x} \right\rangle \mp i\pi\langle\varphi|\delta\rangle = \int \frac{\varphi(x)}{x}dx \mp i\pi\varphi(0)$$

$$\begin{cases} \mathrm{Re}G(\omega,\vec{p}) = \frac{1}{2}(2\pi)^3 \sum_m P \frac{|\langle 0|\psi_\alpha(0)|m\rangle|^2 \delta(\vec{p}-\vec{p}_m)}{\omega+\mu-\varepsilon_m^+} + \frac{|\langle m|\psi_\alpha(0)|0\rangle|^2 \delta(\vec{p}+\vec{p}_m)}{\omega+\mu-\varepsilon_m^-} \\ \mathrm{Im}G(\omega,\vec{p}) = \begin{cases} -4\pi^2 \sum_m |\langle 0|\psi_\alpha(0)|m\rangle|^2 \delta(\vec{p}-\vec{p}_m)\delta(\omega+\mu-\varepsilon^+) & \omega \rangle 0 \text{ من أجل} \\ 4\pi^2 \sum_m |\langle m|\psi_\alpha(0)|0\rangle|^2 \delta(\vec{p}+\vec{p}_m)\delta(\omega+\mu-\varepsilon^-) & \omega \langle 0 \text{ من أجل} \end{cases} \end{cases} \quad (2.30)_F$$

والقسم التخيلي

فإشارة $\mathrm{Im}G(\omega,\vec{p})$ هي - إشارة ω.

إن الخاصة الأساسية لدالات غرين في الفضاء الثنوي، فضاء الاندفاع هو وجود القطبين في النقطتين $\omega = \varepsilon_m^{\pm} - \mu$.

4.2- دالة غرين للغاز الكامل الفيرميوني

لنطبق ما سبق لحساب دالة غرين لغاز كامل فيرميوني. يمكننا على الدوام نشر مؤثر شرودينغر $\psi_\alpha(\vec{r})$ كسلسلة موجات مستوية، ذات اندفاع وسبين محددين تشكل قاعدة في الفضاء الهيلبرتي

$$\psi_{p\alpha} = \frac{u_\alpha}{\sqrt{V}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} \quad (2.31)$$

حيث u_α سعة السبينور المنظمة للواحد $u_\alpha \bar{u}_\alpha = 1$، $\psi_{p\alpha}$ منظمة للواحد بوجود $\frac{1}{\sqrt{V}}$، نكتب

$$\psi_\alpha(\vec{r}) = \sum_{p,\sigma} a_{p\alpha}\, \psi_{p\alpha}(\vec{r},\vec{\sigma}) \quad (2.32)$$

ننتقل من مؤثرات شرودينغر إلى مؤثرات هايزنبرغ حسب (2.2) بأن نأخذ الانتقال من الحالة البدائية $|m\rangle$ إلى الحالة النهائية $\langle n|$ التي ينخفض فيها عدد الجسيمات بجسيم واحد، بحيث يصبح $\psi_\alpha(\vec{r})$ حسب (2.25)

$$\psi_\alpha(\vec{r},t) = e^{-i\left(\frac{p^2}{2m}-\mu\right)t} \sum_{p,\sigma} a_{p\alpha}\, \psi_{p\alpha}(\vec{r},\vec{\sigma}) \quad (2.33)$$

يكتب $\psi_\alpha^\dagger$ بدليل المؤثرات $a_{p\alpha}^\dagger$ طبعاً. لن نحسب دالة غرين انطلاقاً من التعريف (2.12) والعلاقة (2.33) وإنما باللجوء إلى الخواص التي جمعناها لهذه الدالة. نحسب مشتقها بالنسبة للزمن t_1 آخذين الانقطاع في $t_1 = t_2$ بعين الاعتبار. لدينا من (2.13)

$$G_{\alpha\beta} = G_{\alpha\beta}\Big|_{t_1 = t_2 + 0} - G_{\alpha\beta}\Big|_{t_1 = t_2 - 0}$$
$$= -i\left\langle \psi_\alpha^\dagger(t_1, \vec{r}_1)\psi_\beta(t_1, \vec{r}_2) + \psi_\beta^\dagger(t_1, \vec{r}_2)\psi_\beta(t_1, \vec{r}_2)\right\rangle$$

ومن جهة ثانية فإن الطرف الثاني هو المبادل المضاد أي أن

$$G_{\alpha\beta} = -i\delta_{\alpha\beta}\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\theta(t_1 - t_2)$$

ضربنا المبادل بدالة هيفسايد لأخذ الطفرة في قيمة $G_{\alpha\beta}$ في t_1 بعين الاعتبار وهكذا ونظراً لأن مشتق θ هو دالة ديراك δ فإن

$$\frac{\partial}{\partial t_1}G_{\alpha\beta} = -i\delta_{\alpha\beta}\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\delta(t_1 - t_2) \qquad (2.34)$$

ويساوي من جهة أخرى بالعودة إلى (2.13)

$$= -i\left\langle T\frac{\partial\psi_\alpha(x_1)}{\partial t_1}\psi_\beta^\dagger(x_2)\right\rangle$$

تحقق ψ_α المعادلة (2.11) الحرة أي بدون الحدود بـ $U^{(1)}$، $U^{(2)}$، ...

$$i\hbar\frac{\partial\psi_\alpha}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu\right)\psi_\alpha$$

نكتبها على الشكل (1) في الفقرة §2.2 و $\hbar = 1$

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right)\psi_\alpha(t, \vec{r}) = 0$$

فنحصل مباشرة على المعادلة التي تحققها دالة غرين حسب (2)

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right)G^0(t, \vec{r}) = \delta(t)\delta(\vec{r}) \qquad (2.35)$$

x هنا هو $x = t, \vec{r}$ و $\delta(x) = \delta(t)\delta(\vec{r})$. رمزنا لـ $G^0_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}G^0$ لنشير إلى أن دالة غرين هذه هي عندما لا يوجد أي تفاعل (غاز كامل).

لنلاحظ أنه من الممكن الوصول إلى (2.35) دون اللجوء إلى الخواص العامة لدالة غرين بأن نبدل $i\frac{\partial\psi_\alpha}{\partial t}$ في (2.34) بقيمتها المعطاة في (2.11).

نحصل على محول فوريي لدالة غرين بنفس الطريقة التي وصلنا بها إلى (5)

$$G^{(0)}(\omega, \vec{p}) = \frac{1}{\omega - \frac{p^2}{2m} + \mu}$$

ونجعلها منتظمة في القطب $\omega + \mu = \frac{p^2}{2m}$ بإضافة المقدار $+i0 \cdot sgn\omega$ هي sign هي إشارة ω إلى القسم التخيلي لـ $G^0(\omega, \bar{p})$ كما في (6) و'(2.30)

$$G^{(0)}(\omega, \bar{p}) = \frac{1}{\omega^2 - \frac{p^2}{2m} + \mu + i0sgn\omega}$$

يفضل في كثير من الأحيان كتابة الانتظام بدليل اندفاع فيرمي p_F، ذلك أن الكمون الكيميائي لغاز كامل فيرميوني هو $\mu = \frac{p_F^2}{2m}$، ومن جهة أخرى فإن p لا تختلف كثيراً عن p_F في الحالات ضعيفة الإثارة ولذا نكتب قيمة ω في القطب

$$\omega = \frac{1}{2m}\left(p^2 - p_F^2\right) = \frac{1}{2m}\left(p - p_F\right)\left(p + p_F\right) \simeq \frac{2}{2m}p_F\left(p - p_F\right) = v_F\left(p - p_F\right)$$

حيث $v_F = \frac{p_F}{m}$ وبالتالي فإن $sgn\omega = sgn\left(p - p_F\right)$

و

$$G^{(0)}(\omega, \bar{p}) = \frac{1}{\omega^2 - \frac{p^2}{2m} + \mu + i0sgn\left(p - p_F\right)} \qquad (2.36)$$

نستطيع بفضل هذه الكتابة التحقق من كون عدد الجسيمات $N(\bar{p})$ يساوي الصفر من أجل $p \rangle p_F$ والواحد من أجل $p \langle p_F$ كما يقتضيه غاز فيرمي الكامل في درجة الصفر المطلق. لدينا في الواقع حسب (2.23)

$$N(\bar{p}) = \frac{-i}{2\pi}\lim_{t\to 0}\int \frac{e^{-i\omega t}}{\omega^2 - \frac{p^2}{2m} + \mu + i0sgn\left(p - p_F\right)}d\omega$$

نختار دائر تكامل على شكل نصف دائرة في النصف العلوي للمستوي العقدي لـ ω، نجعل قطرها يتناهى إلى اللانهاية ونجعل t تتناهى إلى الصفر فيزول الحد $e^{-i\omega t}$. فإذا كان $p \rangle p_F$ فلا وجود لقطب في هذا الدائر والتكامل يساوي الصفر وإذا كان $p \langle p_F$ فحساب البواقي يعطي $N(\bar{p}) = 1$.

تمكننا دالة غرين من حساب المقادير الترموديناميكية، الكمون الترموديناميكي الكبير (((3.30).2).II) و(2.§2.1) على سبيل المثال

$$\Omega = E - TS - \mu N = -PV$$

الذي يصبح في درجة الصفر المطلق

$$\Omega = E - \mu N$$

طاقة القاع E وعدد الجسيمات N ثابتان في حجم ثابت (و $T = 0$)

$$d\Omega = -Nd\mu$$

ومنه، بالعودة إلى (2.24) التي أعطتنا $\frac{N}{V}$ ونظراً للقضية 5 من الفصل الثاني التي تبين أن Ω دالة متجانسة بـ μ، تنعدم Ω عندما ينعدم الكمون الكيميائي وهو ما تؤيده العلاقة ((2.(3.11) التي تعطي قيمة Ω في جوار الصفر المطلق، فإن

$$\Omega = 2iV\int_0^{\mu} d\mu \cdot \lim_{t\to -0}\int G(\omega, \vec{p})e^{-i\omega t}\frac{d\omega d\vec{p}}{(2\pi)^4} \qquad (2.37)$$

5.2- دالة غرين للبوزونات

يختلف الغاز البوزوني عن الغاز الفيرميوني اختلافاً جذرياً في الصفر المطلق كما نعلم؛ إذ تحتل الفيرميونات مستويات طاقة تمتد بين طاقة القاع ومستوى فيرمي المعين بالكمون الكيميائي، بينما تتكثف البوزونات في مستوى طاقة القاع، الطاقة صفر، كما يبقى القسم الغالب منها متجمعاً في هذه الطاقة حتى عندما نتجاوز الصفر المطلق. وهكذا فإن القيمة الوسطية $\langle\psi_0^{\dagger}\psi_0\rangle = N_0$ هي ذات القيمة الوسطية لـ $\langle\psi_0\psi_0^{\dagger}\rangle$ حسب علاقة المبادلة البوزونية : $\psi_0^{\dagger}\psi_0 - \psi_0\psi_0^{\dagger} = -1$ عندما نهمل 1 أمام العدد الكبير N_0. أو بتعبير آخر إن علاقة المبادلة معدومة في هذه الحالة بحيث يمكن النظر إلى المؤثرين المتساويين $\psi_0^{\dagger}$ وψ_0 كعددين كبيرين مساويين لـ $\sqrt{N_0}$ وإلى الجداء $\psi_0^{\dagger}\psi_0^{\dagger}\psi_0\psi_0$ في هاميلتوني التفاعل زوجاً زوجاً كعدد مساو لـ N_0^2.

ننشر المؤثر البوزوني لغاز كامل ذي السبين المساوي لصفر (حتى لا نضع دليل سبين إضافي) على شكل سلسلة فوريي بأمواج مستوية

$$\psi(t, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}a_p e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\vec{p}}{r} - \frac{p^2}{2m}t\right)}$$

تخضع المؤثرات a_p و $a_p^{\dagger}$ إلى علاقة المبادلة $\left[a_p^{\dagger}, a_p\right] = -1$ ولدينا المؤثر a_0 الذي أصبح عدداً $N = \frac{N_0}{\sqrt{V}}$. علينا إذاً أن نكتب المؤثر البوزوني في مجال درجة الحرارة التي يبقى فيها التكثف غالباً أي في المجال $[0, \lambda]$، حيث λ نقطة عبور الطور إلى فائقية السيولة، على الشكل

$$\psi = \phi + \psi' \quad , \quad \psi^{\dagger} = \phi^{\dagger} + \psi'^{\dagger} \qquad (2.38)$$

ϕ و$\phi^{\dagger}$ مؤثرات يفعلان في نفس الحالة $|m, N\rangle$ حيث ننظر إلى الحالة بـ $N\pm 1$ كمساوية للحالة N لكبر هذا العدد، m تحدد الحالة الكمومية و N عدد الجسيمات. لدينا

$$\phi|m, N+1\rangle = \varphi|m, N\rangle$$

$$\phi^{\dagger}|m, N\rangle = \overline{\varphi}|m, N+1\rangle$$

حتى عندما m, N و $m, N+1$ بين الحالتين N سعة الانتقال بين الحالتين m, N و $m, N+1$ حتى عندما φ و $\bar{\varphi}$ عددان عقديان مترافقان يمثلان سعة الانتقال بين الحالتين يتناهى العدد N إلى ∞ :

$$\lim_{N\to\infty}\langle m, N|\phi|m, N+1\rangle = \varphi \qquad (2.39)$$

$$\lim_{N\to\infty}\langle m, N+1|\phi^{\dagger}|m, N\rangle = \bar{\varphi}$$

هذا في حين تنعدم سعة انتقال المؤثر ψ'، الذي يفعل في البوزونات الواقعة فوق التكثف، وهي صغيرة العدد عندما لا تتجاوز درجة الحرارة النقطة λ، بين هاتين الحالتين :

$$\lim_{N\to\infty}\langle m, N|\psi'|m, N+1\rangle = 0 \qquad (2.40)$$

$$\lim_{N\to\infty}\langle m, N+1|\psi'^{\dagger}|m, N\rangle = 0$$

إن العدد φ مستقل عن الإحداثيات عندما يكون المائع البوزوني متجانساً وساكناً، ويأخذ، عندما نختار طوراً مناسباً للعدد العقدي القيمة

$$\varphi = \sqrt{\frac{N_0}{V}} = \sqrt{n_0} \qquad (2.41)$$

n_0 عدد الجسيمات المكثفة في واحدة الحجوم، نكتب مؤثر الكثافة كما في (2.15) (السبين مساوي للصفر)

$$N\rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \langle m, N|\psi^{\dagger}(t, \vec{r}_2)\psi(t, \vec{r}_1)|m, N\rangle$$

ونرى من العلاقات الثلاث السابقة أنه يساوي لـ

$$N\rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = n_0 + N\rho'(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \qquad (2.42)$$

تشير ρ' إلى مؤثر الكثافة فوق المكثف (Condensate) الذي يتناهى إلى الصفر عندما $\vec{r}_1 - \vec{r}_2 \to \infty$ على غرار مؤثرات الكثافة للمائع العادي ولكن يبقى هنا المؤثر $\frac{n_0}{N}$ الذي يميز المائع فائق السيولة (في المجال $[0, \lambda]$). نرى من (2.42) أن محول فورييه لـ ρ الذي يحدد توزع الاندفاعات

$$N(\bar{p}) = N\int\rho(\bar{r})e^{-i\bar{p}\cdot\bar{r}}d\bar{r}$$

$$= (2\pi)^3 n_0\delta(\bar{p}) + N\int\rho'(\bar{r})e^{-i\bar{p}\cdot\bar{r}}d\bar{r}$$

يقابل الحد بدالة ديراك احتمال كون اندفاع الجسيم مساوياً بالضبط للصفر.

لا نريد الدخول في تفاصيل أخرى لفائقية السيولة[3]، ولذا فلن ننظر إلا إلى حالة البوزونات التي يختفي فيها التكثف، أي إلى البوزونات في درجة حرارة أعلى من الدرجة λ، فنعرف دالة غرين في (2.13) من أجل $\psi = \psi'$ وحدها وسبين مساو للصفر (ونتخلص على هذا الشكل من حدود التكثف التي تضيف n_0 في العلاقات التالية). لدينا، كما في (2.18)

$$\rho(\bar{r}) = \frac{i}{n}G(t=-0, \bar{r}) \qquad (2.43)$$

[3] نحيل القارئ المهتم إلى الفقرة 26 (والفقرات التي تليها) من كتاب Lifshitz and Pitaeveskii, Statistical Physics Part 2.

وكما في (2.24)

$$\frac{N}{V} = i \lim_{t \to -0} \int G(\omega, \vec{p}) e^{-i\omega t} \frac{d\omega d\vec{p}}{(2\pi)^4} \tag{2.44}$$

مذكرين أنه في حالة نظمة وحدات تأخذ $\hbar$ فيها القيمة 1، فإن $\vec{k} = \vec{p}$ و $k^0 = E = \omega$. نحسب محول فوريي لدالة غرين على غرار ما فعلناه للوصول إلى $(2.30)_F$ فنجد أن

$$G(\omega, \vec{p}) = (2\pi)^3 \sum_m \left\{ \frac{\langle 0|\psi(0)|m\rangle^2 \delta(\vec{p} - \vec{p}_m)}{\omega + \mu + E_0(N) - E_m(N+1) + i0} - \frac{\langle m|\psi(0)|0\rangle^2 \delta(\vec{p} + \vec{p}_m)}{\omega + \mu + E_m(N-1) - E_0(N) - i0} \right. \tag{2.45}$$

حيث ψ هو مؤثر شرودينغر المقابل لـ ψ' : للبوزونات في درجة حرارة أعلى من الدرجة λ. لا تختلف هذه العلاقة عن نظيرتها الفيرميونية إلا باختفاء المعامل 2 المقابل لسبين 1/2 ولوجود إشارة – في الحد الثاني الناتجة عن المعامل ζ في علاقة المبادلة. ثم إن الطاقة في الدرجة صفر مساوية للصفر في حالة البوزونات بينما تمتد بين الصفر و μ من أجل الفيرميونات أي أن

$$E_m(N+1) - E_0(N) - \mu \simeq E_m(N+1) - E_0(N+1) = \varepsilon_m(N+1) > 0$$

حيث وضعنا كما في الحالة الفيرميونية $\mu \simeq E_0(N+1) - E_0(N)$، هذا فيما يخص الحد الأول من الطرف الثاني في (2.45)، كذلك

$$E_m(N-1) - E_0(N) + \mu \simeq E_m(N-1) - E_0(N-1) = \varepsilon_m(N-1) > 0$$

ومنه

$$G(\omega, \vec{p}) = (2\pi)^3 \sum_m \left\{ \frac{\langle 0|\psi(0)|m\rangle^2 \delta(\vec{p} - \vec{p}_m)}{\omega - \varepsilon_m + i0} - \frac{\langle m|\psi(0)|0\rangle^2 \delta(\vec{p} + \vec{p}_m)}{\omega + \varepsilon_m - i0} \right\} \tag{2.45'}$$

6.2– دالة غرين المؤخرة والمسبقة

عندما تكون درجة الحرارة مختلفة عن الصفر فإننا نأخذ القيمة الوسطية بالنسبة لتوزع جيبس أي أن

$$\langle \quad \rangle = \sum_n \rho_n \langle n|\ldots|n\rangle \tag{2.46}$$

حيث $\rho_n = e^{-\beta(E_n - \mu N_n - \Omega)}$ و Ω الكمون الترموديناميكي الكبير.

تعريف 3 :

نعرف دالة غرين المؤخرة بالعلاقة

$$iG^r(X_1, X_2) = \begin{cases} [\psi, \psi^\dagger]_\varsigma & t_1 > t_2 \\ 0 & t_1 < t_2 \end{cases} \tag{2.47)^r$$

والمسبقة بالعلاقة

$$iG^{aV} = \begin{cases} 0 & t_1 > t_2 \\ -[\psi, \psi^\dagger]_\varsigma & t_1 < t_2 \end{cases} \tag{2.47)^{aV}$$

تكمن أهمية هذه الكتابة في إعطاء محول فوريي لهاتين الدالتين صيغة تحليلية لا وجود فيها لنقاط شاذة.

لدينا على سبيل المثال من أجل دالة غرين المؤخرة

$$G^r(\omega, \vec{p}) = \int d\vec{r} \int_0^\infty G(t, \vec{r}) e^{i(\omega t - \vec{p} \cdot \vec{r})} dt \tag{2.48}$$

يحسّن التكامل في نصف المستوى العلوي لـ ω تقارب هذه الدالة. كذلك $G^{aV}(\omega, \vec{p})$ دالة تحليلية بالمتغير ω في نصف المستوى السفلي ولدينا

$$G^{aV}(\overline{\omega}) = \overline{G^r(\omega)}$$

لنركز انتباهنا على الحالة الفيرميونية وننشر $G^r(t, \vec{r})$ كما في (2.29) و(2.30)، عندما كانت درجة الحرارة مساوية للصفر، آخذين (2.13) بعين الاعتبار لنجد

$$iG^r(t, \vec{r}) = \frac{1}{2} \sum_{n,m} \rho_n \Big\{ e^{-i(\omega_{mn} t - \vec{k}_{mn} \cdot \vec{r})} \langle n|\psi_\alpha(0)|m\rangle\langle m|\psi_\alpha^\dagger(0)|n\rangle + e^{i(\omega_{mn} t - \vec{k}_{mn} \cdot \vec{r})} \langle n|\psi_\alpha^\dagger(0)|m\rangle\langle m|\psi_\alpha(0)|n\rangle \Big\} \tag{2.48)'$$

حيث

$$\vec{k}_{mn} = \vec{p}_m - \vec{p}_n \quad \text{و} \quad \omega_{mn} = E_m - E_n - \mu(N_m - N_n) \tag{2.49}$$

نرمز، تسهيلاً للكتابة لـ $\langle n|\psi_\alpha(0)|m\rangle\langle m|\psi_\alpha^\dagger(0)|n\rangle$ بـ A_{mn}.

لنلاحظ أن $N_n = N_m - 1$ في الحد الأول من الطرف الثاني في حين يساوي $N_m + 1$ في الحد الثاني منه.

نبادل في الحد الثاني m و n ونكتبه على الشكل

$$\rho_m e^{i(\omega_{nm} t - \vec{k}_{nm} \cdot \vec{r})} A_{mn} \quad ، \quad \vec{k}_{nm} = -\vec{k}_{mn}$$

ومنه

$$iG^r(t, \vec{r}) = \frac{1}{2} \sum_{n,m} \rho_n e^{-i(\omega_{mn} t - \vec{k}_{mn} \cdot \vec{r})} A_{mn} \left(1 + \frac{\rho_m}{\rho_n} e^{i(\omega_{nm} + \omega_{mn})} \right)$$

لكن

$$\frac{\rho_m}{\rho_n} = e^{-\beta(E_m - \mu N_m - (E_n - \mu N_n))}$$

$$= e^{-\beta\omega_{mn}}$$

و $\omega_{mn} + \omega_{nm} = 0$ ؛ وأخيراً

$$iG^r(t, \vec{r}) = \frac{1}{2}\sum_{m,n} \rho_n e^{-i(\omega_{mn} t - \vec{k}_{mn} \cdot \vec{r})} A_{mn} \left(1 + e^{-\beta\omega_{mn}}\right) \quad t \rangle 0 \qquad (2.48)''$$

نحصل على محول فوريي لـ G^r كما في $(2.30)_F$

$$G^r_F(\omega, \vec{p}) = \frac{1}{2}(2\pi)^3 \sum_{m,n} \rho_n \frac{A_{mn}\delta(\vec{p} - \vec{k}_{mn})}{\omega - \omega_{mn} + i0}\left(1 + e^{-\beta\omega_{mn}}\right) \qquad (2.48)_F$$

ونحسب قسمه الحقيقي والتخيلي باستعمال التوزيعة $\frac{1}{x + i0} = \frac{1}{x} - i\pi\delta(x)$.

نحسب بنفس الطريقة دالة غرين المعرفة بـ (2.13) انطلاقاً من (2.46) لنجد

$$G_F(\omega, \vec{p}) = -\frac{1}{2}(2\pi)^3 \sum_{m,n} \rho_n A_{mn} \delta(\vec{p} - \vec{k}_{mn}) \times \left\{\frac{1}{\omega_{mn} - \omega}\left(1 + e^{-\beta\omega_{mn}}\right) + i\pi\delta(\omega - \omega_{mn})\left(1 - e^{-\beta\omega_{mn}}\right)\right\} \qquad (2.50)$$

نرى بمقارنة هذه العلاقة مع $(2.48)_F$ (بعد وضعها على الشكل $\frac{1}{x + i0} = \frac{1}{x} - i\pi\delta(x)$) أن

$$G^r_F(\omega, \vec{p}) = \mathrm{Re}G_F(\omega, \vec{p}) + i\coth\left(\frac{\beta\omega}{2}\right)\mathrm{Im}G_F(\omega, \vec{p}) \qquad (2.51)^r$$

(كتبنا عند المقارنة $1 - e^{-\beta\omega} \frac{1 + e^{-\beta\omega}}{1 - e^{-\beta\omega}} = 1 + e^{-\beta\omega}$)

ولدينا علاقة مماثلة لـ G^{aV} (حيث تتبدل إشارة i0) :

$$G^{aV} = \mathrm{Re}G_F(\omega, \vec{p}) - i\coth\left(\frac{\beta\omega}{2}\right)\mathrm{Im}G_F(\omega, \vec{p}) \qquad (2.51)^{aV}$$

نلاحظ أن دالة غرين، على خلاف G^r و G^{aV}، ليست دالة تحليلية.

عندما تتناهى T نحو الصفر يتناهى $\coth\left(\frac{\beta\omega}{2}\right)$ إلى إشارة ω، وبالتالي فإن قيمة G على المحور الحقيقي حسب (2.51) هي

$$G = \begin{cases} G^r & , \omega \rangle 0 \\ G^{aV} & , \omega \langle 0 \end{cases} \qquad (2.52)$$

وهكذا فإن G(ω) تساوي لدالة تحليلية على نصفي المحور الحقيقي عندما تتناهى T إلى الصفر. ركزنا تماماً على الحالة الفرميونية. لا يختلف حساب الحالة البوزونية في شيء وتختلف النتيجة بزوال العامل الفرميوني $\frac{1}{2}$ وبإشارة مضادة. نجد

$$G_B^r(\omega, \vec{p}) = (2\pi)^3 \sum_{m,n} \frac{\rho_n A_{mn} \delta(\vec{p} - \vec{k}_{mn})}{\omega - \omega_{mn} + i0} \left(1 - e^{-\beta\omega_{mn}}\right)$$

ويساوي

$$G_B^r(\omega, \vec{p}) = \mathrm{Re}G_B(\omega, \vec{p}) + i\,\mathrm{th}\left(\frac{\beta\omega}{2}\right)\mathrm{Im}G_B(\omega, \vec{p})$$

و $\mathrm{Im}G_B(\omega, \vec{p}) \langle 0$ من أجل ω حقيقي، في حين $\mathrm{sgn}\,\mathrm{Im}G_F(\omega, \vec{p}) = -\mathrm{sgn}\omega$.

3. مخططات فاينمان

1.3– مبرهنة فيك Wick

إن عنصر المصفوفة الذي يحدد سعة إحداث جسيم ما معرف بالمؤثر a في نقطة x ، $x = t, \bar{x}$ وفناءه في نقطة أخرى y ، $y = t', \bar{y}$ و $t' > t$ هو

$$\langle 0|a(y)a^{\dagger}(x)|0\rangle \tag{3.1}$$

حيث $\langle 0|$ متجهة حالة الخواء.

لنفرض أن لدينا مجموعة من المؤثرات الخطية A_i ، أي أن كلاً منها مؤلف من مجموعة خطية من مؤثرات الإحداث والفناء وأننا نريد حساب عنصر المصفوفة

$$\langle 0|A_1(x_1)\dots A_n(x_n)|0\rangle \tag{3.2}$$

يسهل حساب هذه السعة إذا ما استطعنا ترتيب المؤثرات فيها بحيث تقع مؤثرات الفناء a_i ، على سبيل المثال، على اليمين ومؤثرات الخلق $a_j^{\dagger}$ على اليسار لأن $0 = a_i|0\rangle$ و $\langle 0|a_j^{\dagger} = 0$ ونقول عندئذ إننا كتبنا الصيغة (3.1) بشكل نظامي. نرمز للكتابة النظامية بـ

$$:A_1(x_1)A_2(x_2)\dots A_n(x_n): \tag{3.3}$$

تتطلب هذه الكتابة إدخال المبادل $\left[a_i, a_j^{\dagger}\right]$ عندما يكون وضع هذين المؤثرين في الجداء هو $a_i a_j^{\dagger}$

$$a_i a_j^{\dagger} = \left[a_i, a_j^{\dagger}\right] + \zeta a_j^{\dagger} a_i$$

$\zeta = 1$ من أجل المبادل (البوزونات) و $\zeta = -1$ من أجل المبادل المضاد (الفيرميونات) ليكن لدينا، للتوضيح الجداء التالي

$$A_1(x)A_2(y) = \left(a_1^{\dagger}(x) + a_1(x)\right)\left(a_2^{\dagger}(y) + a_2(y)\right)$$
$$= a_1^{\dagger}(x)a_2^{\dagger}(y) + a_1^{\dagger}(x)a_1(y) + a_1(x)a_2^{\dagger}(y) + a_1(x)a_2(y)$$

لا نحتاج هنا إلا لتبديل الحد الثالث في الجداء لكي تصبح الصيغة نظامية، وبالتالي

$$= :A_1(x)A_2(y): + \left[a_1, a_2^{\dagger}\right] \tag{3.4}$$

وهكذا فإن

$$\langle 0|A_1(x)A_2(y)|0\rangle = \left[a_1, a_2^{\dagger}\right] \qquad (3.4)'$$

نكتب اختصاراً هذه العلاقة على الشكل

$$\underline{A_1(x)A_2}(y) = \left[a_1, a_2^{\dagger}\right] \qquad (3.4)''$$

ونقول إننا عرفنا القرن pairing أو التقليص العادي لهذين المؤثرين. لنلاحظ أنه لا معنى لكتابة مصفوفة من الشكل (3.1) إلا إذا كان الترتيب الزمني صحيحاً : الإحداث قبل الفناء $t'>t$. لذا نكتب الترتيب الزمني للجداء على الشكل

$$T\left(A_1(x_1)\ldots A_n(x_n)\right) = \zeta A_{j_1}\left(x_{j_1}\right)\ldots A_{j_n}\left(x_{j_n}\right) \qquad (3.5)$$

حيث $x_i = x_i^0, \bar{x}$ $(x^0 = t)$ و $x_{j_1}^0 > x_{j_2}^0 \ldots > x_{j_n}^0$ و $\zeta = (-1)^P$، P عدد تبديلات المؤثرات الفيوميونية في التبديل $1, 2, \ldots, n \leftarrow j_1 \ldots j_n$، الذي يقود إلى الترتيب الزمني، يطلق على P اسم سوية التبديلات الفيرميونية ونعرف، على غرار تعريف القرن (التقلص) العادي، القرن الزمني (المرتب زمنياً) الذي نرمز له بـ ‿ من أجل مؤثرين ما ونكتب انطلاقاً من "(3.4) و(3.5)

$$(3.6)\quad \langle 0|TA_1(x)A_2(y)|0\rangle = \overline{A_1(x)A_2}(y) = \begin{cases} \underline{A_1(x)A_2}(y) & x_0 > y_0 \quad \text{من أجل} \\ \zeta \underline{A_2(y)A_1}(x) & y_0 > x_0 \quad \text{من أجل} \end{cases}$$

لدينا المبرهنة التالية، مبرهنة فيك، التي نسردها بدون برهان.

إن جداء n مؤثر خطي هو مجموع كل الجداءات النظامية الحاوية على كل التقليصات العادية بين مختلف أزواج المؤثرات المكونة للجداء، أي إن

$$\begin{aligned} A_1(x_1)\ldots A_n(x_n) = {}&:A_1(x_1)\ldots A_n(x_n): + :\underline{A_1(x_1)A_2}(x_2)\ldots A_n(x_n): \\ &+ \ldots\ldots + :\underline{A_1(x_1)\ldots A_{n-1}}(x_{n-1})A_n(x_n): + :\underline{A_1(x_1)\ldots A_n}(x_n): \\ &+ :\underline{A_1(x_1)A_2}(x_2)\underline{A_3(x_3)A_4}(x_4)\ldots A_n: + \ldots\ldots \end{aligned} \qquad (3.7)$$

حيث وضعنا تعريفاً

$$:A_1(x_1)\ldots \underline{A_j(x_j)\ldots A_k}(x_k)\ldots A_n(x_n): \;=\; \zeta \underline{A_j(x_j)A_k}(x_k) :A_1(x_1)\ldots A_n(x_n):$$

$\zeta = (-1)^P$ هي سوية التبديلات الفيرميونية في التبديل

1, 2… j-1, j, j+1… k-1, k, k+1… n

j, k, 1, 2…j-1, j+1…k-1, k+1…n

تتيح العلاقتان (3.5) و(3.6) تعميم مبرهنة فيك إلى الجداء المرتب زمنياً وكتابة

$$T\left(A_1(x_1)\dots A_n(x_n)\right)=\zeta\{:A_{j_1}(x_{j_1})\dots A_{j_n}(x_{j_n}):+:\overline{A_{j_1}(x_{j_1})A}_{j_2}(x_{j_2})\dots A_{j_n}(x_{j_n}):$$

$$+\dots+:\overline{A_{j_1}(x_{j_1})\dots A}_{j_{n-1}}(x_{j_{n-1}})A_{j_n}(x_{j_n}):+:\overline{A_{j_1}(x_{j_1})\dots\dots A}_{j_n}(x_{j_n}): \tag{3.8}$$

$$+:\overline{A_{j_1}(x_{j_1})A}_{j_2}(x_{j_2})\overline{A_{j_3}(x_{j_3})A}_{j_4}(x_{j_4})\dots A_{j_n}(x_{j_n}):+\dots$$

لدينا في حالة مؤثرين على سبيل المثال

$$T\left(A_1(x_1)A_2(x_2)\right)=\begin{cases}:A_1(x_1)A_2(x_2):+\underline{A_1(x_1)A_2}(x_2) & \text{من أجل } x_{0_1}>x_{0_2}\\ \zeta A_2A_1=\zeta\{:A_2(x_2)A_1(x_1):+\underline{A_2(x_2)A_1}(x_1)\} & \text{من أجل } x_{0_2}>x_{0_1}\\ =:A_1(x_1)A_2(x_2):+\overline{A_1(x_1)A_2}(x_2)\end{cases} \tag{3.9}$$

تعريف 4 :

نسمي السعة

$$\langle 0|TA_1(x_1)A_2(x_2)|0\rangle=\overline{A_1(x_1)A_2}(x_2) \tag{3.10}$$

ناشر فاينمان عندما يكون المؤثران A_1 و A_2 مؤثري نفس الجسيم. وهكذا يحدد ناشر فاينمان سيرورة إحداث هذا الجسيم في النقطة $x_2=x_2^0,\vec{x}_2$ وفناءه في النقطة $x_1=x_1^0,\vec{x}_1$.

2.3- ناشر فاينمان (دالة غرين) في الفيزياء الإحصائية

نستعير تقنية حساب سعة السيرورة المستعملة في ميكانيك الكم – وفي نظرية الحقول المكممة على وجه التخصيص –، والتي أعطينا فكرة عنها في الرقم السابق، ونطبقها في الفيزياء الإحصائية حيث يعين β المتزايد، مقلوب درجة الحرارة المتناقصة حسب المبدأ الثاني في الترموديناميك، سهماً مقابلاً لسهم الزمن T المتزايد ونعرف التقلص "الزماني" في هذه الحالة بالقول

تعريف 5 :

نسمي تقلصاً "زمنياً" متسلسلاً لمؤثرين تابعين لـ β $a(\tau_1)$ و $b(\tau_2)$ القيمة الوسطية لجدائهما المرتب المحسوبة بدليل مؤثر الكثافة ρ_0 ونكتب

$$\overline{a(\tau_1)b}(\tau_2)=\langle T\,a\,b\rangle_0=Tr\rho_0Ta(\tau_1)b(\tau_2) \tag{3.11}$$

نقول تجاوزاً إنها القيمة الوسطية في الخواء لأنها لا تأخذ التفاعل وهاميلتونيه H' وبالتالي مؤثر كثافته ρ' بعين الاعتبار. لنلاحظ أنه من الضروري عندما يكون المؤثران a و b مؤثري إحداث وفناء أن يعبرا عن

نفس الحالة الكمومية وإلا فليس للجداء عناصر قطرية والأثر Tr معدوم لأن عناصر ρ_0 قطرية كلها.

لدينا

قضية 2 :

تعطي الصيغة التالية قيمة التقلص الزماني

$$\overline{a(\tau_1)b(\tau_2)} = \begin{cases} \dfrac{\left[a(\tau_1), b(\tau_2)\right]_{-\zeta}}{1-\zeta e^{\pm\beta(\varepsilon_i-\mu)}} & \text{من أجل } \tau_1 > \tau_2 \\ \dfrac{\zeta\left[b(\tau_2), a(\tau_1)\right]_{-\zeta}}{1-\zeta e^{\pm\beta(\varepsilon_i-\mu)}} & \text{من أجل } \tau_2 \geq \tau_2 \end{cases} \quad (3.12)$$

حيث الإشارة ± في الدالة الأسية في المخرج تقابل حالة كون المؤثر الأول (على اليسار) في علاقة المبادلة مؤثر إحداث، +، أو مؤثر فناء -1.

تبين هذه الصيغة أن العلاقة بين التقلص "الزماني" والتقلص العادي في الفيزياء الإحصائية أكثر تعقيداً من العلاقة (3.6) حيث التقلص العادي هو المبادل حسب "(3.4)، ذلك أن

$$\mathrm{Tr}\rho_0 a(\tau_1)b(\tau_2) = \mathrm{Tr}\rho_0\left[a(\tau_1), b(\tau_2)\right]_{-\zeta} + \zeta \mathrm{Tr}\rho_0 b(\tau_2)a(\tau_1) \quad (3.12)'$$
$$= \left[a(\tau_1), b(\tau_2)\right]_{-\zeta} + \zeta \mathrm{Tr}\, a\,\rho_0 b(\tau_2)$$

نظراً لأن $\mathrm{Tr}\rho_0 = 1$ و $\mathrm{Tr}ABC = \mathrm{Tr}CAB$. نحصل على (3.12) عندما نجد العلاقة بين $\mathrm{Tr}\rho_0 ab$ و $\mathrm{Tr}a\rho_0 b$. لدينا

تمهيدة :

إن

$$a\rho_0 = \begin{cases} \rho_0 a\, e^{\beta(\varepsilon_k-\mu)} & a = a_k^\dagger : \text{في حال كون } a \text{ مؤثر إحداث} \\ \rho_0 a\, e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)} & a = a_k : \text{في حال كون } a \text{ مؤثر فناء} \end{cases} \quad (3.13)$$

لنكتب جداء $\rho_0^{-1}a\rho_0$ على الشكل (1)

$$\rho_0^{-1}a\rho_0 = e^{\alpha}a\,e^{-\alpha} \quad (2)$$

ولنفرض أنه تابع لوسيط λ حسب العلاقة

$$a(\lambda) = e^{\alpha\lambda}ae^{-\alpha\lambda} \quad (3)$$

كتبناه على هذا الشكل لأن $a(1) = e^{\alpha}ae^{-\alpha}$، ولنحسب مشتقاته

$$\frac{da}{d\lambda} = \alpha\, e^{\alpha\lambda}ae^{-\alpha\lambda} - e^{\alpha\lambda}a\,e^{-\alpha\lambda}\alpha = \left[\alpha, a(\lambda)\right]$$

كذلك

$$\frac{d^2a}{d\lambda^2} = \left[\alpha, \left[\alpha, a(\lambda)\right]\right] \quad (4)$$

نرى بالتكرار أن $\frac{d^n a}{d\lambda^n}$ يساوي لـ n مبادلة متتالية لـ $a(\lambda)$ مع α. ننشر (2) حسب صيغة تايلورمن أجل أي قيمة لـ λ، آخذين بعين الاعتبار (3)، (4)، الخ... ونحصل من أجل قيمة الوسيط $\lambda = 1$ والنشر في جوار النقطة 0 على

$$e^{\alpha} a e^{-\alpha} = a(1) = a(0) + 1\left.\frac{da}{d\lambda}\right|_{\lambda=0} + \ldots$$

وبالتالي

$$e^{\alpha} a e^{-\alpha} = a + [\alpha, a] + \frac{1}{2}\left[\alpha, [\alpha, a]\right] + \ldots \quad (5)$$

نعبر عن مؤثر الكثافة ρ_0 بدليل مؤثرات عدد الجسيمات ذات الطاقة المعينة ε_j، $a_j^\dagger a_j$:

$$-\alpha = \beta(\mu N - H_0) = \beta\sum_j(\mu - \varepsilon_j)a_j^\dagger a_j$$

لنجد

$$(6)\ e^{\alpha} a e^{-\alpha} = a + \sum_j \beta(\varepsilon_j - \mu)\left[a_j^\dagger a_j, a\right] + \frac{1}{2}\sum_{j,l}\beta^2(\varepsilon_j - \mu)(\varepsilon_l - \mu)\left[a_j^\dagger a_j, \left[a_l^\dagger a_l, a\right]\right] + \ldots$$

نرى من المتطابقة $[AB, C] = [A, C]B + A[B, C]$ أن

$$\left[a_j^\dagger a_j, a\right] = \left[a_j^\dagger, a\right]a_j + a_j^\dagger\left[a_j, a\right] = \begin{cases} a_j^\dagger \delta_{jk} & a = a_k^\dagger \text{ من أجل} \\ -a_j\delta_{jk} & a = a_k \text{ من أجل} \end{cases} \quad (7)$$

سواء تعلق الأمر بالبوزونات أو الفيرميونات، لدينا إذاً بتبديل هاتين القيمتين في (6)

$$e^{\alpha} a_k^\dagger e^{-\alpha} = a_k^\dagger\left[1 + \beta(\varepsilon_k - \mu) + \frac{1}{2}\beta^2(\varepsilon_k - \mu)^2 + \ldots\right. \qquad a_k^\dagger = a \text{ من أجل}$$

$$e^{\alpha} a_k e^{-\alpha} = a_k\left[1 - \beta(\varepsilon_k - \mu) + \frac{1}{2}\beta^2(\varepsilon_k - \mu)^2 \ldots\right. \qquad a_k = a \text{ من أجل}$$

ونكون بذلك قد برهنا التمهيدة.

نبدل $Tra\rho_0 b$ في الطرف الثاني من '(3.12) بـ $e^{\pm\rho_0(\varepsilon_k - \mu)}Tr\rho_0 ab$ فنحصل نظراً لـ (3.11) على (3.12) ونكون قد برهنا القضية 2 بشقيها.

ملاحظة :

يمكننا أن نعرف التقليص العادي في الفيزياء الإحصائية كما في الميكانيك الكمومي بدليل علاقة المبادلة فنكتب تعريفاً

$$\underline{a\,b} = \langle a\,b\rangle_0 = \frac{[a, b]_{-\zeta}}{1 - \zeta e^{\pm\beta(\varepsilon_{ki} - \mu)}} \quad (3.14)$$

ونكتب الصيغة (3.12) على الشكل المعتاد للعلاقة بين التقليص العادي والتقليص الزماني كما في (3.6)

$$\overline{a(\tau_1)b}(\tau_2) = \begin{cases} a(\tau_1)b(\tau_2) & \tau_1 > \tau_2 \text{ من أجل } \\ \zeta\, \underline{b(\tau_2)a}(\tau_1) & \tau_2 \geq \tau_2 \text{ من أجل } \end{cases} \qquad (3.14)'$$

تعريف 6 :

نطلق على التقليص الزماني اسم دالة غرين أو ناشر فاينمان نرمز له بـ $g_{st}(\tau_1, \tau_2)$ ونكتب

$$g_{st}(\tau_1, \tau_2) = \begin{cases} = \dfrac{\left[a_s(\tau_1), a_t^\dagger(\tau_2)\right]_{-\zeta}}{1 - \zeta e^{-\beta(\varepsilon_s - \mu)}} & \tau_1 > \tau_2 \text{ من أجل } \\ = \dfrac{\zeta\left[a_t^\dagger(\tau_2), a_s(\tau_1)\right]_{-\zeta}}{1 - \zeta e^{+\beta(\varepsilon_s - \mu)}} & \tau_2 \geq \tau_1 \text{ من أجل } \end{cases} \qquad (3.15)$$

يمكن التعبير عن هذه الدالات بالانتقال من تمثيل هايزنبرغ – المؤثر تابع لـ β (لدرجة الحرارة، "للزمن") إلى تمثيل شرودينغر بالاستعانة بمؤثر الكثافة الذي حل محل مؤثر التطور U. لدينا من (3.13) ما يعرف باسم مؤثرات ماتسوبارا Matsubara

$$a_t^\dagger(\tau) = \rho_0^{-1} a_t^\dagger \rho_0 = a_t^\dagger e^{\tau(\varepsilon_t - \mu)}$$

$$a_s(\tau) = \rho_0^{-1} a_s \rho_0 = a_s e^{-\tau(\varepsilon_s - \mu)}$$

بحيث يأخذ المبادل في العلاقة الأولى من (3.15) الشكل

$$\left[a_s(\tau_1), a_t^\dagger(\tau_2)\right]_{-\zeta} = e^{(\tau_2 - \tau_1)(\varepsilon_s - \mu)}\delta_{st}$$

لأن $\left[a_s, a_t^\dagger\right]_{-\zeta} = \delta_{st}$،

وفي العلاقة الثانية من (3.15)

$$\left[a_t^\dagger(\tau_2), a_s(\tau_1)\right]_{-\zeta} = -\zeta e^{(\tau_2 - \tau_1)(\varepsilon_s - \mu)}\delta_{st}$$

لأن $\left[a_t^\dagger, a_s\right]_{-\zeta} = -\zeta\delta_{st}$.

أما المخرج في العلاقة الأولى فهو

$$1 + \zeta \langle N_s \rangle_0$$

وفي الثانية $-\zeta\langle N_s\rangle_0$، حيث $\langle N_s\rangle_0$ هي عدد الجسيمات في الصفر المطلق، $\beta = \infty$ والتوازن الترموديناميكي المقابل لـ ρ_0. وهكذا فإن

$$g_{st}(\tau_1, \tau_2) = \delta_{st} e^{(\tau_2 - \tau_1)(\varepsilon_s - \mu)}\left(1 + \zeta\langle N_s\rangle_0\right) \qquad \tau_1 > \tau_2 \text{ من أجل } \qquad (3.16)$$

$$g_{st}(\tau_1, \tau_2) = \zeta\delta_{st} e^{(\tau_2 - \tau_1)(\varepsilon_s - \mu)}\langle N_s\rangle_0 \qquad \tau_2 \geq \tau_1 \text{ من أجل } \qquad (3.17)$$

تصبح العلاقات السابقة في حالة التوازن $\tau_2 = \tau_1$

$$\overline{a_s^\dagger a_t} = \underline{a_s^\dagger a_t} = \frac{\left[a_s^\dagger, a_t\right]_{-\zeta}}{1-\zeta e^{\beta(\varepsilon_s-\mu)}} = \frac{-\zeta\delta_{st}}{1-\zeta e^{\beta(\varepsilon_s-\mu)}} \qquad (3.17)'$$

ومن أجل $s = t$

$$\overline{a_s^\dagger a_s} = Tr\rho_0 N_s = \langle N_s \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_s-\mu)}-\zeta} \qquad (3.17)''$$

و

$$\overline{a_s a_s^\dagger} = \zeta\overline{a_s^\dagger a_s} + 1 = \zeta\langle N_s\rangle + 1 = \frac{\left[a_s, a_s^\dagger\right]_{-\zeta}}{1-\zeta e^{-\beta(\varepsilon_s-\mu)}} \qquad (3.16)'$$

وتأخذ (3.16) الشكل التالي من أجل درجتي حرارة مختلفتين

$$g_{st}(\tau_1, \tau_2) = \overline{a_s(\tau_1)a_t^\dagger(\tau_2)} = e^{(\tau_2-\tau_1)(\varepsilon_s-\mu)}\overline{a_s a_s^\dagger}\delta_{st} \qquad (\tau_1 \neq \tau_2) \qquad (3.16)''$$

لنلاحظ أخيراً من العلاقتين (3.16) و(3.17) أن دالة غرين، ككل دالات غرين التي اعترضتنا، لا تتوقف إلا على الفرق $(\tau_2 - \tau_1)$

$$g_{st}(\tau_1, \tau_2) = g_{st}(\tau_1 - \tau_2) \qquad (3.18)$$

يقع هذا الفرق في المجال $[-\beta, +\beta]$ $\beta \leq \tau_1 - \tau_2 \leq \beta$- و

$$g_{ss}(\tau_1, \tau_2) = g_s(\tau_1 - \tau_2)$$

3.3– مبرهنة فيك المعممة في الفيزياء الإحصائية

عمم بلوخ ودومينيسيس Domimicis مبرهنة فيك عام 1960 على النحو التالي : تساوي القيمة الوسطية في الخواء (بدليل ρ_0، في حالة التوازن) لـ n مؤثر خلق و n مؤثر فناء مجموع كل الجداءات الممكنة لـ n تقليص زماني على أن يضرب كل حد في هذا المجموع بمعامل $(-1)^c = \pm\zeta$ حيث C عدد تبادلات المؤثرات الفيوميونية اللازمة لتحقيق الـ $\frac{N}{2}$ تقليص زماني.

لنكتب عنصر مصفوفة المؤثر $a_1a_2\ldots a_N$ القطري على الشكل

$$\langle\phi_N|\phi_N\rangle_0 = \langle a_1\ldots a_N\rangle_0 = \langle n_1, \ldots, n_k\ldots|n_1, \ldots, n_k\ldots\rangle$$

ونعرف القيمة الوسطية كما في (3.11)

$$\langle a_1, \ldots, a_N\rangle_0 = Tr\rho_0 a_1\ldots a_N \equiv \sum_{n_1,\ldots n_2\ldots}\langle n_1,\ldots, n_k\ldots|e^{\sum_j\beta(\varepsilon_j-\mu)a_j^\dagger a_j}|n_1,\ldots, n_k\ldots\rangle \qquad (3.19)$$

لنلاحظ في البداية أنه لا معنى لمبرهنة فيك، لا معنى لهذه العلاقة إلا إذا كان عدد مؤثرات الخلق المعينة بعدد كمومي ما k – بطاقة ε_k على سبيل المثال – يساوي لعدد مؤثرات الفناء المعينة بهذا العدد

الكمومي وإلا لأصبح $\langle \phi_N | \phi_N \rangle_0 = 0$ و ρ_0 لا يؤثر على عدد الجسيمات كما رأينا. نعمم $(3.12)'$ على النحو التالي

$$I_N = Tr\rho_0 a_1 \ldots a_N = [a_1, a_2]_{-\zeta} Tr\rho_0 a_3 \ldots a_N + \zeta Tr a_2 a_1 a_3 \ldots a_N \ldots \quad (3.20)$$

ونكرر نفس العملية على الحد الثاني في الطرف الثاني بأن نبادل a_1 مع a_3، a_4...

$$= [a_1, a_2]_{-\zeta} Tr\rho_0 a_3 \ldots a_N + \zeta [a_1, a_3] Tr\rho_0 a_2 a_4 \ldots a_N + \zeta_{12}\zeta_{13} Tr\rho_0 a_2 a_3 a_1 \ldots a_N \quad (3.20)'$$

ζ في الحد الثاني من (3.20) ناتجة عن تبادل 1, 2 فهي توقيع التبديل ζ_{12} ضربناها في الحد الثاني من $(3.20)'$ بـ ζ الناتجة عن تبديل 1, 3 فهي ζ_{13}. وهكذا نرى في كل مرحلة ظهور مبادل يختزل حساب الأثر إلى جداء ρ_0 بـ N-2 مؤثر. وبما أن عدد مؤثرات الفيرميونات زوجي فلا يبقى في المرحلة الأخيرة إلا معامل ζ واحد.

$$\langle a_1 \ldots a_N \rangle = [a_1, a_2]_{-\zeta} Tr\rho_0 a_3 \ldots a_N + \zeta [a_1, a_3]_{-\zeta} Tr\rho_0 a_2 a_4 \ldots a_N + \ldots + \zeta Tr\rho_0 a_2 \ldots a_N a_1 \quad (3.20)''$$

نرى من دورية الأثر Tr و(3.13) أن

$$\zeta Tr\rho_0 a_2 \ldots a_N a_1 = \zeta Tr a_1 \rho_0 a_2 \ldots a_N = \zeta e^{\pm\beta(\varepsilon_1 - \mu)} Tr\rho_0 a_1 a_2 \ldots a_N$$

ومنه

$$\langle a_1 \ldots a_N \rangle \left(1 - \zeta e^{\pm\beta(\varepsilon_1 - \mu)}\right) = [a_1, a_2]_{-\zeta} Tr\rho_0 a_3 \ldots a_N + \zeta [a_1, a_3]_{-\zeta} Tr\rho_0 a_2 a_4 \ldots + \ldots + [a_1, a_N]_{-\zeta} Tr\rho_0 a_2 \ldots a_{N-1} \quad (3.20)'''$$

ونحصل من تعريف التقليص العادي (3.14) على

$$\langle a_1 \ldots a_N \rangle = \underline{a_1 a_2} \langle a_3 a_4 \ldots a_N \rangle + \zeta\, \underline{a_1 a_3} \langle a_2 a_4 \ldots a_N \rangle + \ldots + \underline{a_1 a_N} \langle a_2 \ldots a_{N-1} \rangle$$
$$I_N = \sum_{i=2}^{N} \underline{a_1 a_i} (-1)^{B_i} I_{N-2} \quad (3.21)$$

حيث B_i هي عدد التبديلات الفيرميونية في التبديل

$$1, 2, \ldots i, i+1 \ldots \rightarrow 1, i, \ldots i-1, i+1 \ldots$$

ونكون بذلك قد وصلنا إلى علاقة تكرار نعبر فيها عن القيمة الوسطية في الخواء لـ N مؤثر إلى مجموعة جداءات تقليص عادي بالقيمة الوسطية في الخواء لـ N - 2 (مضروبة بـ $\pm\zeta$) والعلاقة صحيحة من أجل N = 2. ونكون قد برهنا مبرهنة فيك إذا ما لاحظنا أنها صحيحة أيضاً من أجل التقليص الزماني لأن $\overline{a_i(\tau_i) a_j(\tau_j)} = \underline{a_i(\tau_i) a_j(\tau_j)}$ عندما تكون $\tau_i > \tau_j$ أما عندما يكون $\tau_i \le \tau_j$ فإن الانتقال من $a_i a_j$ إلى $a_j a_i$ يدخل عاملاً ζ إضافياً يحول ζ في تعريف التقليص الزماني إلى ζ^2:

$$\overline{a_i(\tau_i) a_j(\tau_j)} = \zeta \underline{a_j(\tau_j) a_i(\tau_i)} \qquad \text{من أجل } \tau_i \le \tau_j$$

و(3.21) محققة في كل الأحوال.

4.3- تمثيل الاضطراب بمخططات

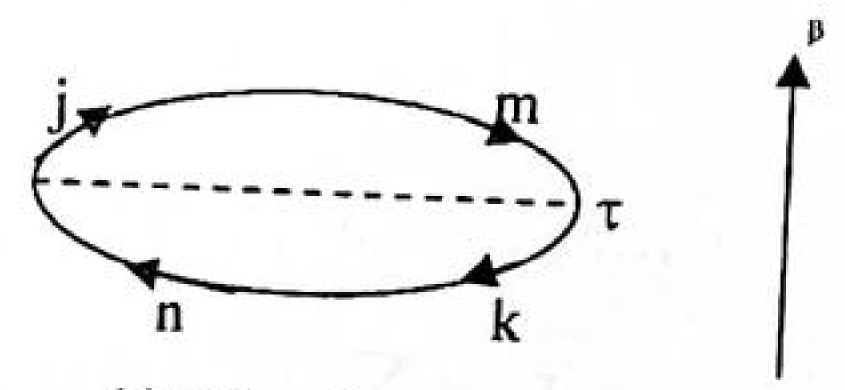
لقد أتاحت لنا مبرهنة فيك حساب القيمة الوسطية – أثر جداء المؤثرات بالمؤثر ρ_0 – بالاستعانة بالتقليص الزماني، أي بالاستعانة بدالات غرين. لكن عدد هذه التقليصات الضخم، $n!$ من أجل n مؤثر خلق و n مؤثر فناء، والإشارة $(-1)^c$ التي ترافق كل تقليص من هذه التقليصات يجعلان إجراء الحساب معقداً أشد تعقيد. ولذا تستعين الفيزياء الإحصائية على غرار نظرية الحقول المكممة بتقنية ابتكرها فاينمان تقرن في حساب القيم الوسطية كل تقلص زماني (تسلسل درجات الحرارة β) بخط يمثل إحداث جسيم في نقطة ما (في درجة حرارة معينة τ_1) وفناءه في درجة حرارة أخرى τ_2 $\tau_2 > \tau_1$.

سنرمز هنا لـ τ بسهم متجه من الأسفل نحو الأعلى، لمؤثرات الخلق والفناء في النقطة τ بـ $a_j(\tau)$ حيث يعين الدليل بالأحرف اللاتينية حالة الجسيم الكمومية. نكتب إذاً عنصر التكامل في التفاعل زوجاً زوجاً على الشكل (3.1) $a_j^{\dagger}(x)a_k^{\dagger}(y)U_{jk,mn}a_m(y)a_n(x)$، نرمز بسهم خارج من النقطة τ لمؤثر الخلق ويسهم داخل إلى النقطة τ لمؤثر الفناء. نرمز للمتغيرات المكانية بنقاط على محور الفواصل وللتفاعل التابع للنقطتين x و y بخط متقطع. لدينا على سبيل المثال في التقليص التالي لتفاعل من الرتبة الأولى

$$a_j^{\dagger} \quad a_k^{\dagger} \quad a_m \quad a_n$$

المخطط

α



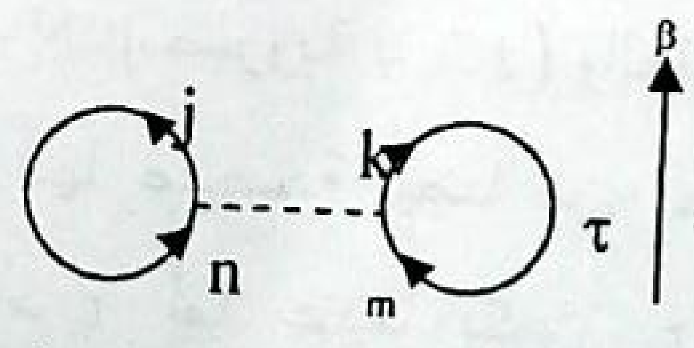
j و n في النقطة x، m و k في النقطة y

هذا في حين يقابل التقليص

$$a_j^{\dagger} \, a_k^{\dagger} \quad a_m \, a_n$$

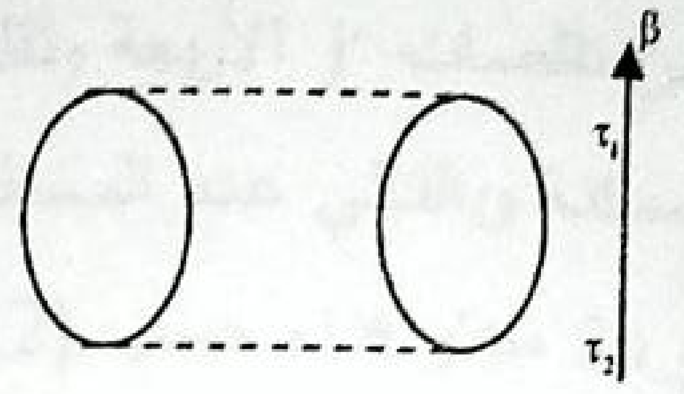
المخطط

β

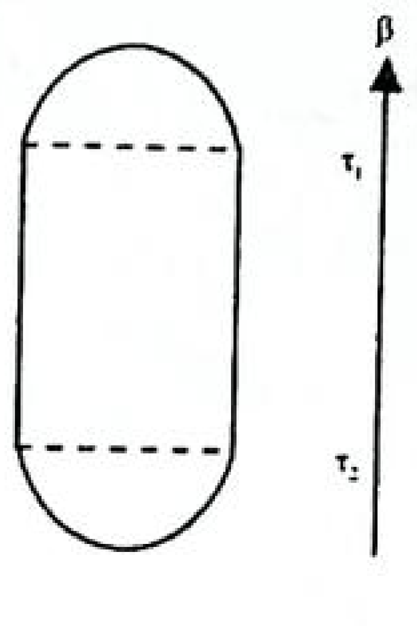


الذي يبين أن خلق الجسيم المعين بـ j – عدد الاحتلال – وفناء الجسيم المعين بـ n يقعان في نقطة واحدة x، وكذا الأمر بالنسبة للجسيمين k و m في النقطة y.

لدينا، عندما ننتقل إلى الرتبة الثانية، حيث يتعلق الأمر بمتغيرين "زمنيين" τ_1 و τ_2 حسب (1.12) خطان أفقيان متقطعان يعينان هذين المتغيرين، ولدينا في الرتبة n، n خطاً متقطعاً. على سبيل المثال نجد في الحدود من الرتبة الثانية مخططات من الشكل



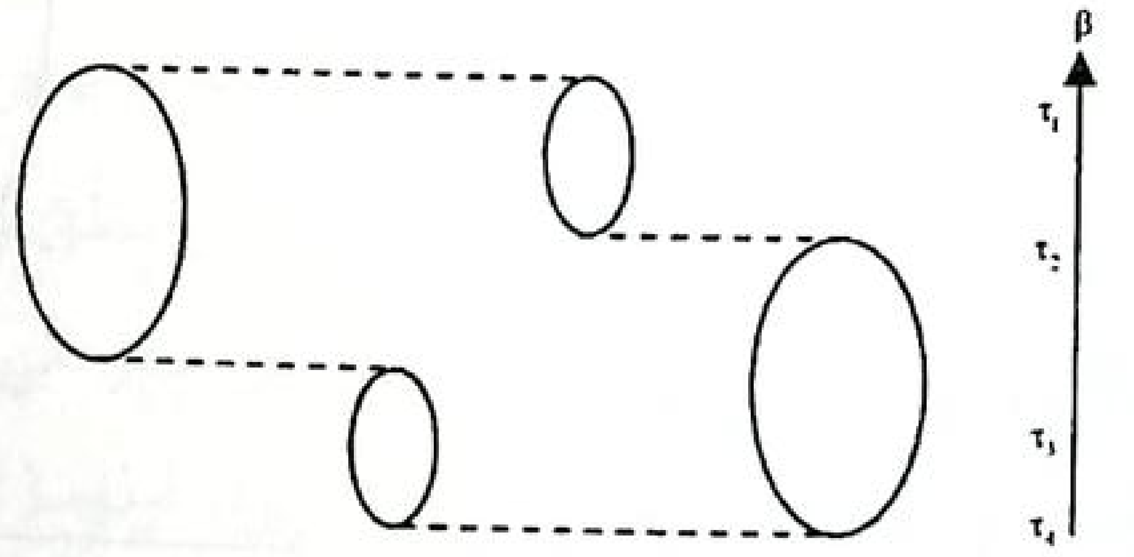
أو من الشكل



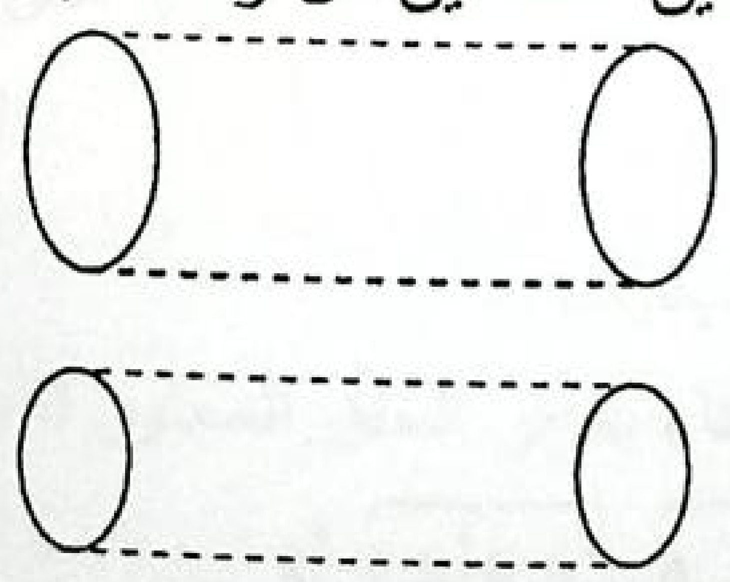
الخ...

لم نعين اتجاهات الخلق والفناء في هذين الحقلين المخططين لأننا لم نكتب التقليصات المقابلة.

كما نجد في الحدود من الرتبة الرابعة مخططات من الشكل



أو على شكل مخططين منفصلين كل واحد منهما من الرتبة الثانية



الخ...

لنأخذ من الرتبة الثانية الحد المقابل للتقليصات التالية:

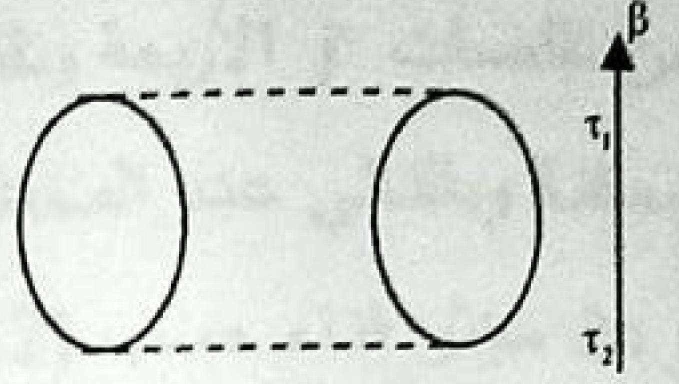
$$\overbrace{a_n(\tau_1)\, a_j^\dagger(\tau_1)}\ \overbrace{a_m(\tau_1)\, a_k^\dagger(\tau_1)}\ \overbrace{a_{n'}(\tau_2)\, a_{j'}^\dagger(\tau_2)}\ \overbrace{a_{m'}(\tau_2)\, a_{k'}^\dagger(\tau_2)} \qquad (3.22)_a$$

التي نعبر عنها بدالات غرين

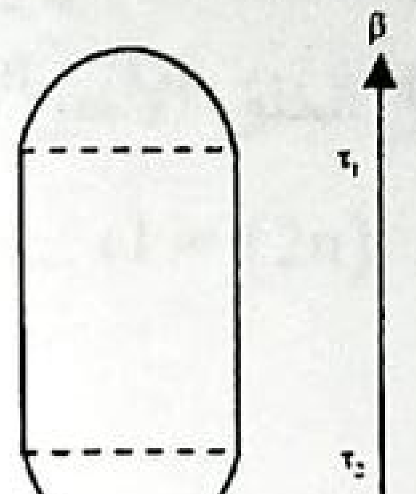
$$g_{nj}(0)\, g_{mk}(0)\, g_{n'j'}(0)\, g_{m'k'}(0)$$

وعدد التبديلات الفيرميونية (كل المؤثرات الفيرميونية هنا) هو $C = 3 + 1 + 3 + 1$ ؛ $(-1)^C = 1$. يمثل هذا الحد المخطط

لدينا، عندما ننتقل إلى الرتبة الثانية، حيث يتعلق الأمر بمتغيرين "زمنيين" τ_1 و τ_2 حسب (1.12) خطان أفقيان متقطعان يعينان هذين المتغيرين، ولدينا في الرتبة n ، n خطاً متقطعاً. على سبيل المثال نجد في الحدود من الرتبة الثانية مخططات من الشكل



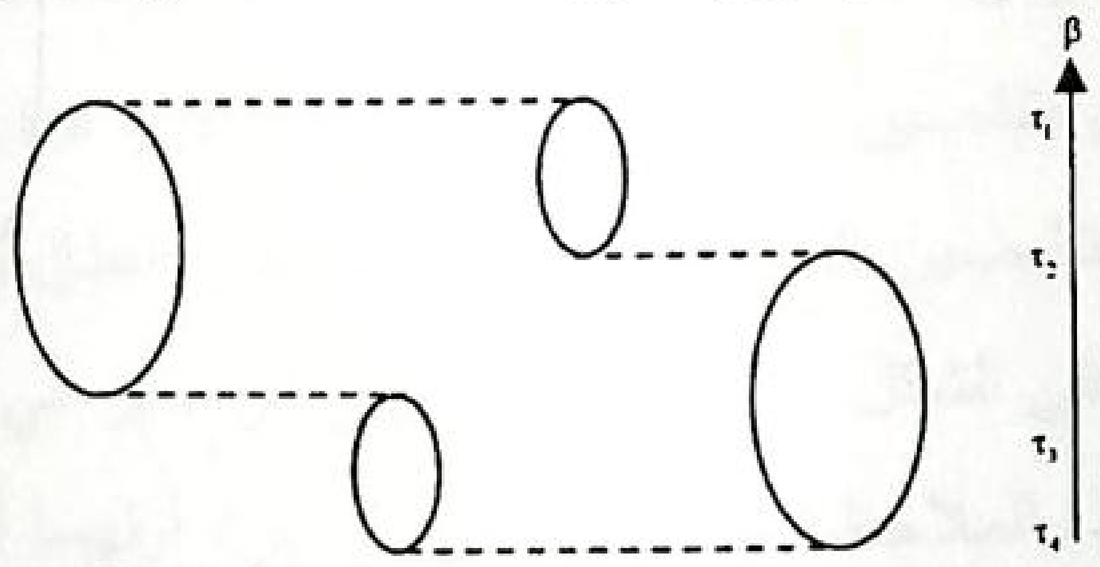
أو من الشكل



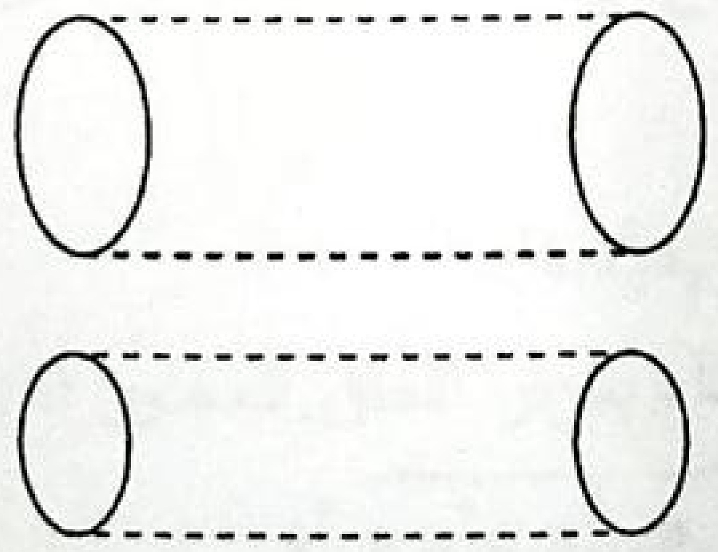
الخ...

لم نعين اتجاهات الخلق والفناء في هذين الحقلين المخططين لأننا لم نكتب التقليصات المقابلة.

كما نجد في الحدود من الرتبة الرابعة مخططات من الشكل



أو على شكل مخططين منفصلين كل واحد منهما من الرتبة الثانية



الخ...

لنأخذ من الرتبة الثانية الحد المقابل للتقليصات التالية:

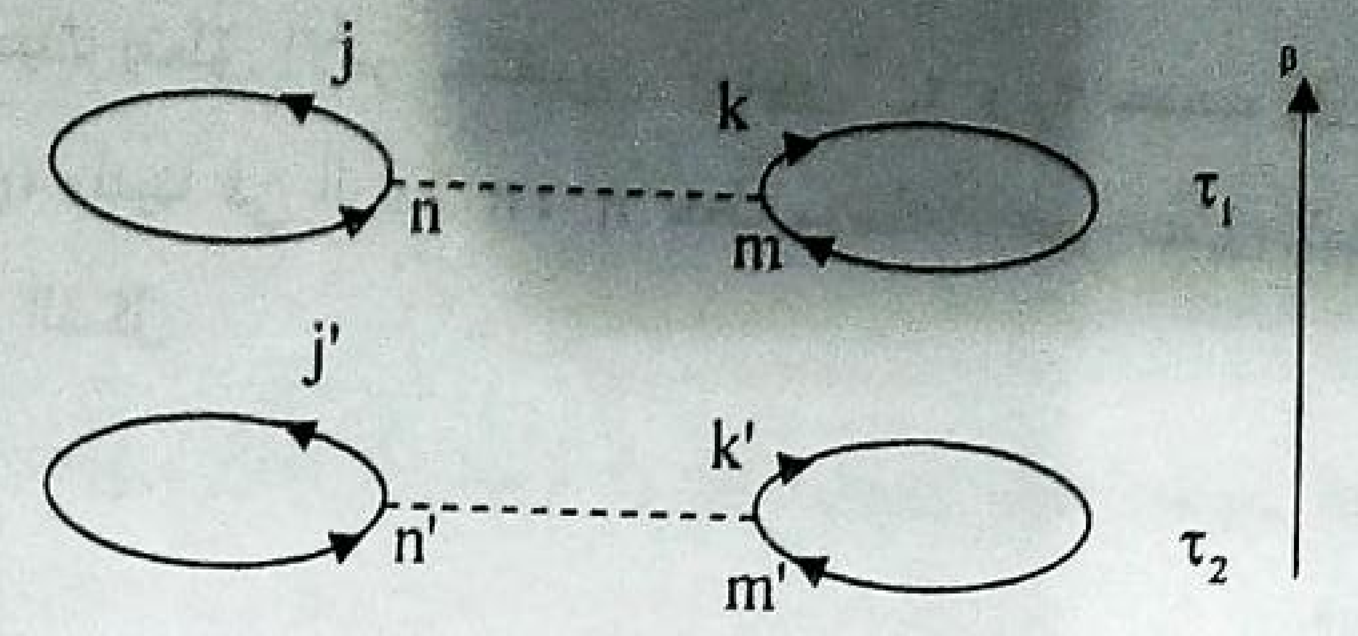
$$\overline{a_n(\tau_1)\, a_j^\dagger(\tau_1)}\ \overline{a_m(\tau_1)\, a_k^\dagger(\tau_1)}\ \overline{a_{n'}(\tau_2)\, a_{j'}^\dagger(\tau_2)}\ \overline{a_{m'}(\tau_2)\, a_{k'}^\dagger(\tau_2)} \qquad (3.22)_a$$

التي نعبر عنها بدالات غرين

$$g_{nj}(0)\,g_{mk}(0)\,g_{n'j'}(0)\,g_{m'k'}(0)$$

وعدد التبديلات الفيرميونية (كل المؤثرات الفيرميونية هنا) هو $C = 3 + 1 + 3 + 1$ ؛ $(-1)^C = 1$. يمثل هذا الحد المخطط

a)



لنأخذ كذلك الحد المقابل للتقليصات التالية:

$$\overline{a_{n'}(\tau_2)a_j^{\dagger}(\tau_1)}\;\overline{a_n(\tau_1)a_{j'}^{\dagger}(\tau_2)}\;\overline{a_{m'}(\tau_2)a_k^{\dagger}(\tau_1)}\;\overline{a_m(\tau_1)a_{k'}^{\dagger}(\tau_2)} \qquad (3.22)_b$$

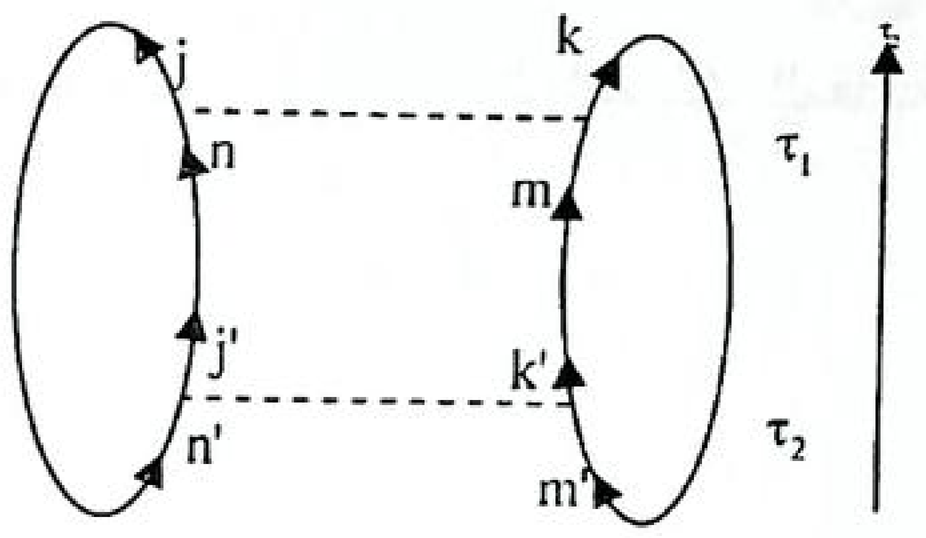
التي تعبر عنها دالات غرين

$$g_{n'j}(\tau_2-\tau_1)g_{nj'}(\tau_1-\tau_2)g_{m'k}(\tau_2-\tau_1)g_{mk'}(\tau_1-\tau_2)$$

و $C = 7+0+5+2 = 14$ ، $(-1)^C = 1$.

يقابل هذا الحد المخطط التالي:

b)



لنأخذ أخيراً الحد المقابل للتقلصات التالية:

$$\zeta\overline{a_m(\tau_1)a_j^{\dagger}(\tau_1)}\;\overline{a_{m'}(\tau_2)a_{j'}^{\dagger}(\tau_2)}\;\overline{a_n(\tau_1)a_{k'}^{\dagger}(\tau_2)}\;\overline{a_{n'}(\tau_2)a_k^{\dagger}(\tau_1)} \qquad (3.22)_c$$

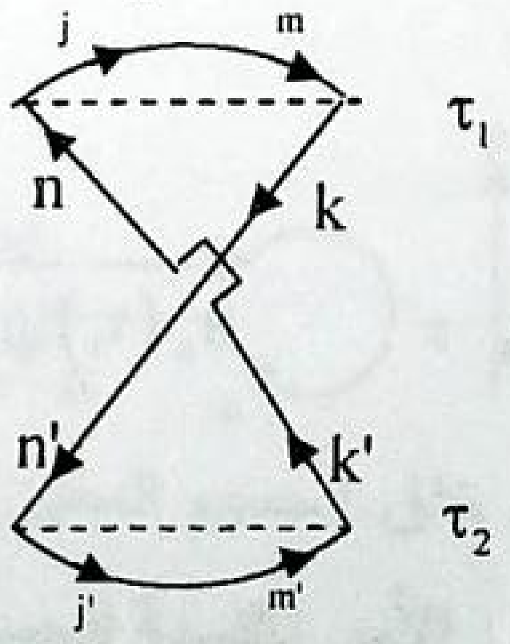
التي تعبر عنها دالات غرين

$$\zeta g_{mj}(0)g_{m'j'}(0)g_{nk'}(\tau_1-\tau_2)g_{n'k}(\tau_2-\tau_1)$$

و $C = 2+2+1+5 = 10$ ، $(-1)^C = \zeta$

يقابل هذا الحد المخطط التالي :

c)



الخ...

لنلاحظ أولاً أن الدليلين J و n يقابلان نفس النقطة في الفضاء، x، و m، k نفس النقطة y. لنلاحظ أيضاً أن عدد حدود الاضطراب من الرتبة الثانية هو $(2n)! = 24$ لأنه يقابل كل تقلص من تقلصات j الأربعة مع 'm، 'n، m، n ثلاثة تقلصات لـ k وعدد التقلصات الكلي هو 12. ونفس الشيء بالنسبة لكل تقلص من تقلصات 'j الأربعة وتقلصات 'k الثلاثة المقابلة. نعمم هذه النتيجة بسهولة للقول إن عدد التقلصات الممكنة وبالتالي عدد المخططات المقابلة للاضطراب من الرتبة n هو $(2n)!$ لأن لدينا 2n مؤثر خلق و 2n مؤثر فناء حسب (1.12) و(3.1) يقابل مؤثر الخلق الأول 2n تقلصاً مع كل مؤثرات الفناء ومؤثر الخلق الثاني $(2n - 1)$ تقلصاً من أجل كل تقلص لمؤثر الخلق الأول والثالث $2n-2$، الخ... ولمؤثر الخلق الأخير تقلص واحد ممكن والعدد الكلي هو

$$2n, 2n-1, 2n-2, \ldots ،1 = (2n)!$$

<u>تعريف 7</u> :

نسمي عروة (Loop) كل خط فيرميوني مغلق في المخطط، كما نسمي رأساً (قمة) Vertex نقطة تلاقي خطين من خطوط مخطط فاينمان.

يلتقي في كل رأس خطان متصلان يمثلان خلق وفناء الجسيم وخط متقطع يمثل التفاعل $U^{(2)}$. وبما أن التفاعل ممثل بتقلصين. $\overbrace{a_k^\dagger a_n}$، $\overbrace{a_j^\dagger a_n}$، مثلاً فإن عدد الرؤوس في الاضطراب من الرتبة n هو 2n.

لنلاحظ أن التقليصين اللذين استعملناهما يمثلان الخلق والفناء في نفس النقطة x أو y وأن كتابة الحد $a_j^\dagger a_k^\dagger a_m a_n$ على الشكل $a_j^\dagger a_n a_k^\dagger a_m$ لا يدخل أي تغير في الإشارة لذا يسمى هذان الزوجان زوجي الرأس. تسمح لنا هذه الملاحظة بالبرهان على أمرين، أولهما أن إشارة العروة الفيرميونية تساوي لـ 1-. يكفي للتحقق من ذلك وضع أي جداء لـ 2s مؤثر خلق وفناء على شكل أزواج رأس وهو لا يدخل أي تغير في الإشارة :

$$a_1^\dagger a_1 a_2^\dagger a_2 \ldots a_s^\dagger a_s$$

ولنقلص كل مؤثر فناء بمؤثر الخلق المجاور له. لم نقم بأي تبادل ولا تغير في الإشارة

$$a_1^\dagger \overbrace{a_1 a_2^\dagger}\overbrace{a_2 a_3^\dagger}\ldots\overbrace{a_{s-1} a_s^\dagger} a_s$$

نحصل على عروة بوضع a_s على يسار $a_1^\dagger$ لتقليصهما معاً وهو ما يدخل إشارة - خلافاً لكل التقليصات الأخرى.

ليكن D عدد العرى في مخطط ما المقابل لحد ما في النشر الاضطرابي، لذا فإن

$$(-1)^D = (-1)^C \tag{3.23}$$

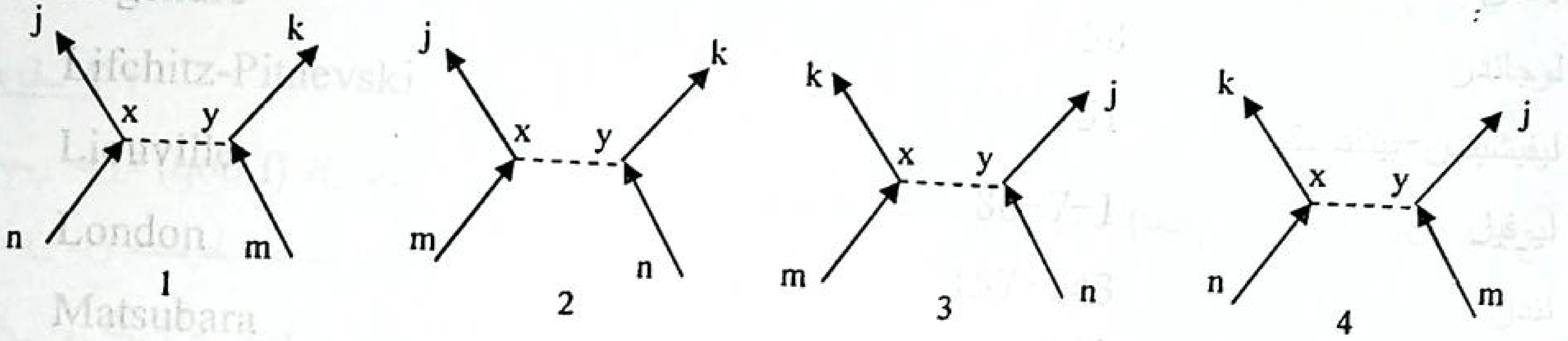
وهو الأمر الثاني الذي أردنا برهانه

$$(-1)^D = (-1)^C$$

وهو المخطط الوحيد c) في المخطط b و 1 في المخطط a و D = 2) في المخطط وهكذا فـ D = 4 ذو الإشارة السالبة.

5.3- المخططات المتناظرة

نريد أن نبين الآن أننا، ولحسن الحظ، لسنا مضطرين لحساب كل المخططات من رتبة معينة n في نشر ρ'؛ ذلك أن عدداً منها يسهم بنفس المقدار في هذا النشر. لنبدأ بمخططات الرتبة الأولى وننظر إلى الرؤوس الأربعة التالية :



إن الفرق بين المخطط (1) والمخطط (2) هو مناقلة المؤثرين الداخلين n و m فإذا كتبنا الحد المقابل للأول على الشكل $\frac{1}{2}U^2_{jk;mn}(x,y)a_j^\dagger a_k^\dagger a_m a_n$ فإن الحد المقابل للثاني هو $\frac{1}{2}U^2_{jk;nm}(x,y)a_j^\dagger a_k^\dagger a_n a_m$

ونكتبهما معاً على الشكل

$$\frac{1}{2}\left(U^2_{jk;mn}+\zeta U^2_{jk;nm}\right)a_j^\dagger a_k^\dagger a_m a_n$$

نسمي مجموع الحدين بين القوسين دالة الرأس المنظرة ونرمز لهما بـ $\Gamma^0_{jk;mn}$.

لا يختلف المخططان (3) و(4) عن (1) و(2) بالترتيب إلا بتبادل x مع y ومجموعهما هو

$$\frac{1}{2}\left(U^2_{kj;nm}+\zeta U^2_{kj;mn}\right)a_j^\dagger a_k^\dagger a_m a_n$$

لا تتغير الإشارة عند الانتقال من jk;mn إلى kj;nm.

نسمي هنا أيضاً مجموع الحدين بين القوسين دالة الرأس المنظرة ونرمز لها بـ $\Gamma^0_{kj;nm}$؛ واضح أن هاتين الدالتين متساويتان

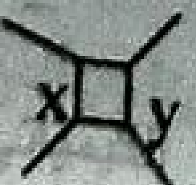
$$\Gamma^0_{jk;mn}=\Gamma^0_{kj;nm}$$

وأن مجموع المخططات الأربعة هو

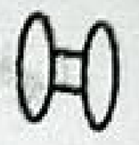
$$\Gamma^0_{jk;mn}a_j^\dagger a_k^\dagger a_m a_n \qquad (1)$$

ونكون بذلك قد حذفنا المعامل $\frac{1}{2}$ في الهاميلتوني.

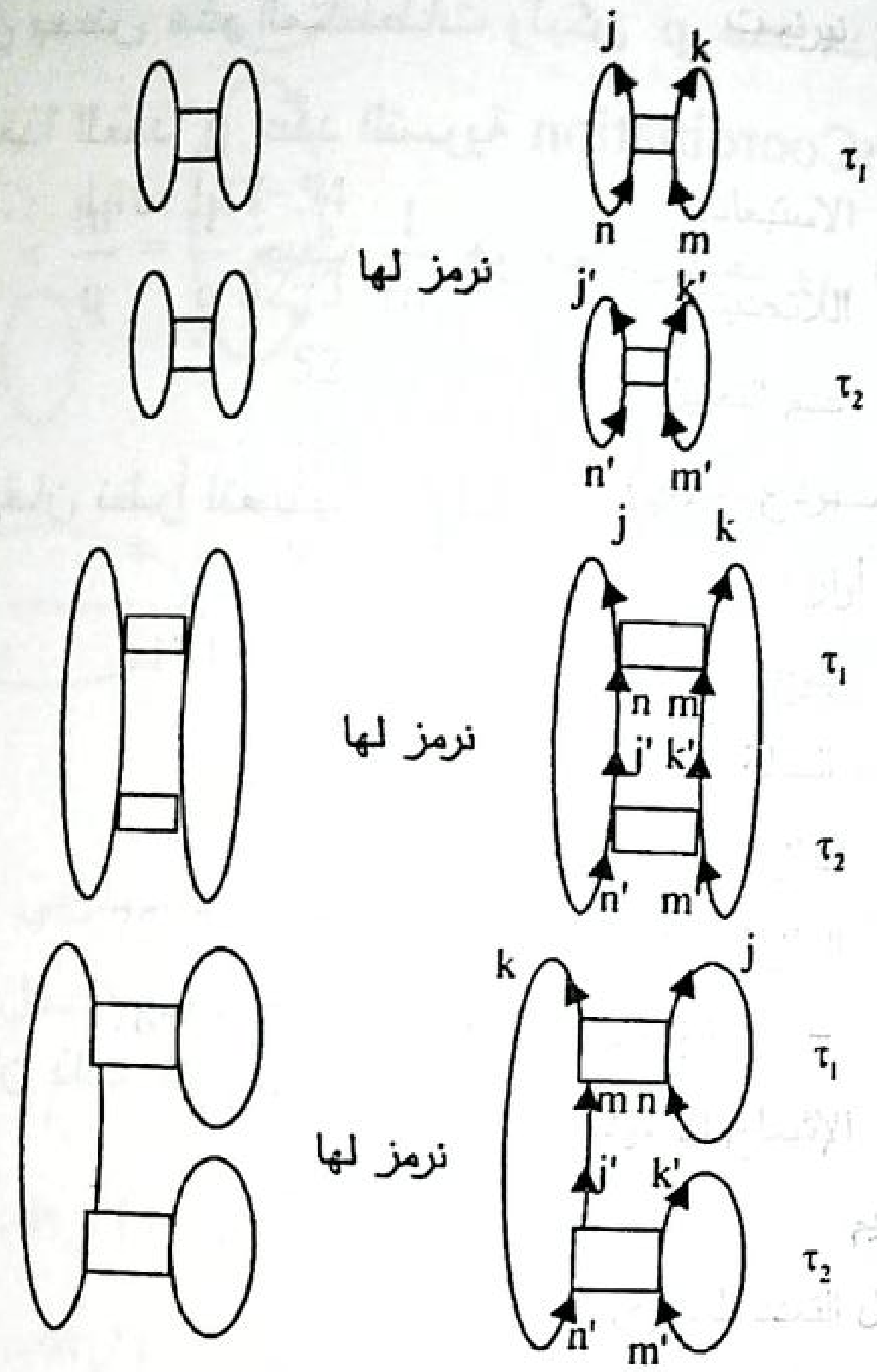
سنرمز إذاً إلى الرأس المتناظر بمربع صغير



ونكتب مخططات الرتبة الأولى الأربعة على الشكل

 $\alpha' - \beta'$

ونعمم هذه العلاقة من أجل مختلف الرتب، فنكتب مخططات الرتبة الثانية على الشكل

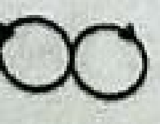


a')

b')

c')

لنلاحظ أن المخططين α' و β' يقابلان أربعة حدود في النشر ولدينا تقلصان فقط؛ وكذلك فإن المخططات (a')، (b')، (c') تقابل كل واحدة منها 16 حداً بينما مجموع التقلصات في الرتبة الثاني هو $2n! = 24$ كما رأينا. يرجع السبب في ذلك إلى استحالة القيام بكل المناقلات الممكنة : عندما يخرج مؤثرا خلق من رأس ما ليصلا إلى رأس ثان فإنهما يثبتان مؤثري الفناء في الرأس الثاني ويقسمان عدد المناقلات إلى 2. نسمي هذين الزوجين من المؤثرات، بالزوجين المتكافئين. لدينا زوجاً متكافئاً في (α')، (β') وزوجان في (a')، (b') ولا يوجد أي زوج في (c') وهكذا يبقى فعلاً مخطط مقابل لحدين في (α')، (β') ومخطط مقابل $\frac{1}{2^2} \times 16 = 4$ حداً في كل من (a') و (b') ومقابل لـ 16 حداً في (c').

نكتب المخطط من الرتبة الأولى على الشكل  من أجل الحد α وعلى الشكل ⌸ من أجل β، عروة واحدة من أجل α وعروتان من أجل β.

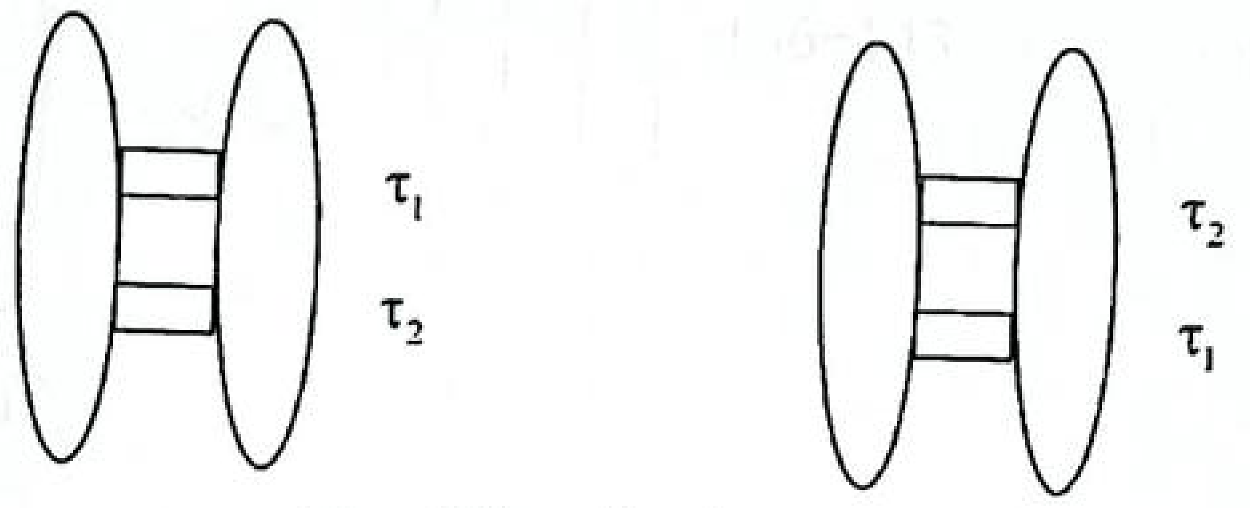
لنلاحظ كذلك أن ما قلناه صحيح في حالة البوزونات والفرميونات على حد سواء، لكن

$$\Gamma^0_{jk;nm} = \Gamma^0_{kj;nm} = -\Gamma^0_{jk;nm} = -\Gamma^0_{kj;mn}$$

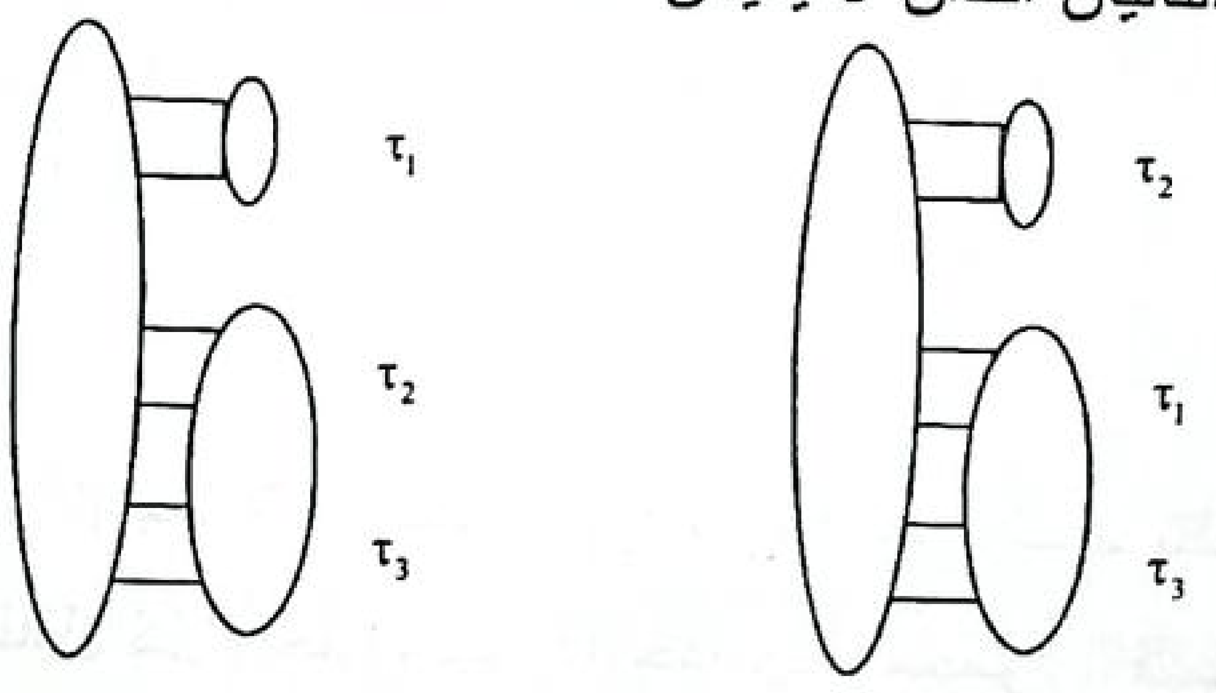
إلا أن مناقلة مؤثري فناء يغير عدد العرى، ينتج عروة أو يحدث عروة ويؤدي بالتالي إلى إدخال المعامل 1- أمام دالة الرأس المنظرة وهو ما يثبت من جديد أن (1) صحيحة سواء تعلق الأمر بالبوزونات أو بالفيرميونات.

لنلاحظ أخيراً أن تبديلات الـ n τ فيما بينها يعطينا !n مخططاً من الرتبة n تقابل ذات التكامل المضاعف من الرتبة n. قد يحدث أن تتطابق بعض هذه المخططات وليكن p عدد هذه المخططات المتطابقة التي تولدها نفس التقلصات، نسمي هذا العدد p عدد التسوية Coordination؛ وهكذا يجب ضر ب كل مخطط من الرتبة n بالمعامل $\frac{1}{n!} \times \frac{n!}{p} = \frac{1}{p}$ حيث $\frac{1}{n!}$ هو معامل الحد من الرتبة n في نشر الاضطراب.

إن المخططين من الرتبة الثانية التاليين متطابقان نظراً لتعيينهما ذات التقلصات وبالتالي ذات دالات غرين.



بينما لا يتطابق المخططان التاليان اللذان لا يعينان ذات التقلصات



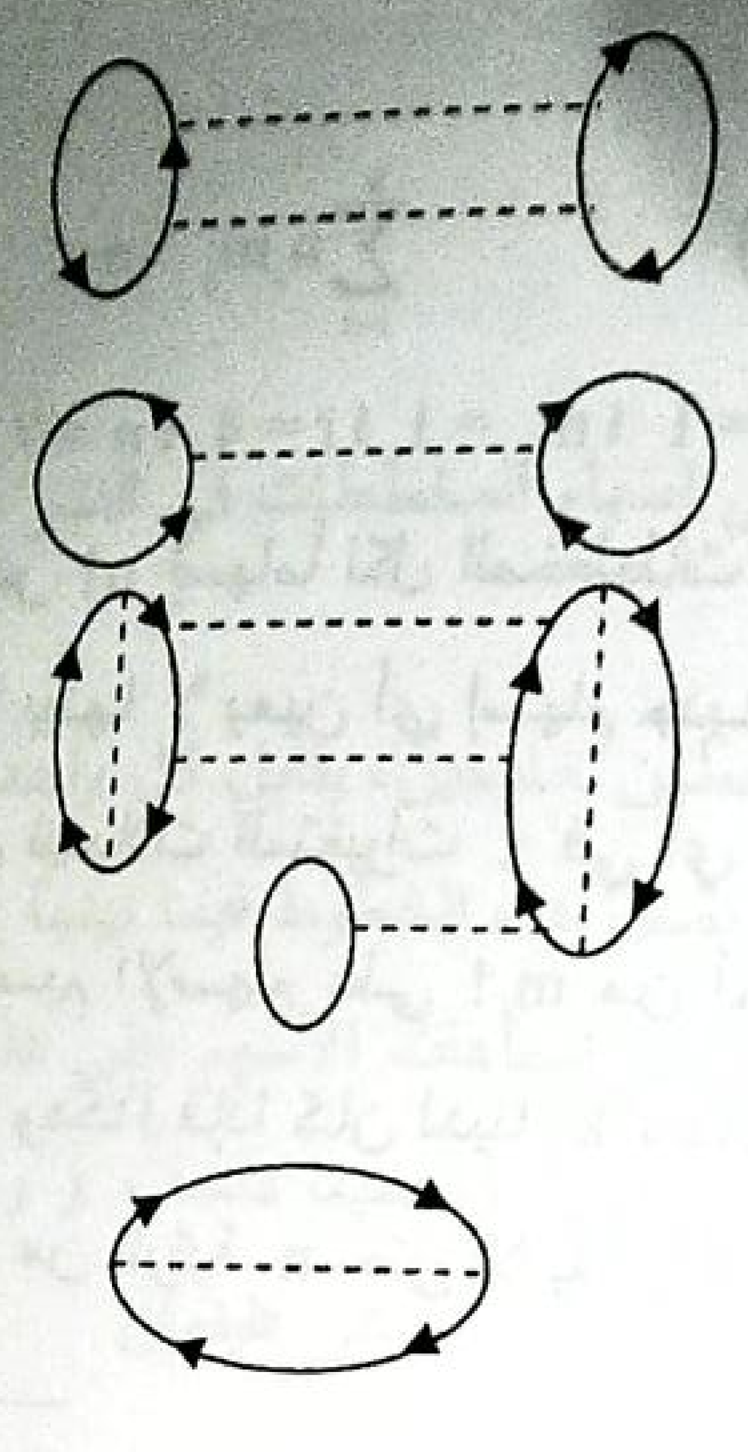
6.3- المخططات المترابطة Connexe

يمكن لمخططات من رتبة ما n أن تتمثل بمخططات فرعية من رتبة أصغر من n غير مترابطة فيما بينها، ونقول عندئذ إن المخطط n قد اختزل إلى مخططات من رتبة أصغر من n.

تعريف 8 :

نقول عن مخطط غير قابل للاختزال إنه مترابط أو إنه غير قابل للاختزال بجسيم واحد ونعني بذلك أن قطع خط واحد فيه، قطع تقلص واحد لا يفصله إلى جزئين غير مترابطين.

لدينا على سبيل المثال المخطط من الرتبة $n = 7$ التالي، الممثل بأربعة مخططات مترابطة حسب التعريف الذي أعطيناه للترابط



إن إسهام المخطط غير المترابط في النشر الاضطرابي هو جداء إسهام المخططات غير المترابطة التي تكونه لأن الدالة $f(\tau_1 \ldots \tau_n)$ هي جداء دالات من الشكل $f(\tau_1 \ldots \tau_{i_1})$ ، $f(\tau_{i_1+1} \ldots \tau_{i_2})$ ، والتكامل من الرتبة n هو جداء تكاملات من الرتبة i_1 ؛ $i_2 - i_{+1}$ ؛ ... - i_n

$$\int_0^{\beta} \cdots \int_0^{\beta} d\tau_1 \ldots d\tau_n f(\tau_1 \ldots \tau_n) = \int_0^{\beta} \cdots \int_0^{\beta} d\tau_1 \ldots d\tau_{i_1} f(\tau_1 \ldots \tau_{i_1}) \times \int_0^{\beta} \cdots \int_0^{\beta} d\tau_{i_1+1} \ldots d\tau_{i_2} f(\tau_{i_{1+1}} \ldots \tau_{i_2})$$
$$\times \ldots \int_0^{\beta} \cdots \int_0^{\beta} \ldots d\tau_n f(\ldots \tau_n) \tag{2}$$

ونقول اختصاراً إن المخطط غير المترابط هو جداء المخططات التي تكونه. وفي واقع الأمر فمن الممكن الاستغناء عن إسهام المخططات غير المترابطة والاكتفاء بإسهام المخططات المترابطة وحدها كما تبين المبرهنة التالية :

The linked cluster-Theorem مبرهنة التجمعات المرتبطة

إن

$$\frac{Z}{Z_0} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{[\mathscr{C}(\beta)]^n}{n!}$$

حيث $\mathscr{C}(\beta)$ هي مجموع إسهامات المخططات المترابطة.

لنأخذ لدينا مخطط من الرتبة n يختزل إلى r مخطط جزئي. ولنرتب هذه المخططات الجزئية على شكل مجموعات من المخططات المترابطة المتطابقة نرمز لها بـ n_i ونرمز لرتبتها بـ m_i وليكن k عدد هذه المجموعات. لدينا

$$\sum_{i=1}^{k} n_i = r \quad ; \quad \sum_{i=1}^{k} n_i m_i = n \qquad (3)$$

لدينا في المثال الذي أعطيناه أعلاه $n = 7$ ؛ $r = 4$ ؛ $m_1 = 1$ ؛ $n_2 = 1$ ، $m_2 = 2$ ؛ $n_3 = 1$ ؛ $m_3 = 3$.

لدينا، عندما نحسب الرتبة n في النشر $n!$ إسهاماً لكل المخططات، لكن بعض هذه المخططات متطابق وتبديلات المخططات المتطابقة فيما بينها لا يعين أي إسهام جديد فإذا كان لدينا n_i مخطط متطابق فيجب تقسيم الإسهام على $n_i!$ ؛ ثم إن تبديلات المتغيرات τ في أي من هذه المخططات ذات الرتبة n_i. لا يولد أي مخطط جديد؛ يجب إذاً تقسيم الإسهام على $m_i!$ من أجل كل مخطط من هذه المخططات وعلى $(m_i!)^{n_i}$ من أجلها جميعاً. وهكذا فإذا كان لدينا k مجموعة من المخططات المتطابقة فإن المعامل الذي يجب أن نضرب به الحد من الرتبة n حتى لا يقع أي تكرار هو

$$\frac{n!}{n_1!\ldots n_k!(m_1!)^{n_1}\ldots(m_k!)^{n_k}}$$

وبضربه بـ $\frac{1}{n!}$، المعامل الوارد في النشر يبقى

$$\frac{1}{n_1!\ldots n_k!(m_1!)^{n_1}\ldots(m_k!)^{n_k}}$$

لنبرهن الآن أن هذا المعامل هو الذي نحصل عليه انطلاقاً من النشر (2) آخذين (3) بعين الاعتبار. إن

$$[\mathscr{C}(\beta)]^r = \left[\sum_{i=1}^{k} n_i \mathscr{C}_i(\beta)\right]^{\sum_{i=1}^{k} n_i}$$

حيث $\mathscr{C}_i(\beta)$ هو إسهام المخطط المترابط من المجموعة i. إن رتبة $\mathscr{C}(\beta)$ هي r ولدينا $\binom{r}{n_1} = \frac{r!}{n_1!(r-n_1)!}$ توفيقاً لاختيار أحد المخططات من المجموعة n_1 و $\binom{r-n_1}{n_2} = \frac{(r-n_1)!}{n_2!(r-n_1-n_2)!}$ توفيقاً لاختيار أحد مخططات المجموعة n_2 وهكذا إلى المجموعة k حيث عدد التوفيقات هو $\binom{r-n_1\ldots n_{k-1}}{n_k}$ عدد التوفيقات الكلي هو

$$\binom{r}{n_1}\cdots\binom{r-n_1\ldots n_{k-1}}{n_k} = \frac{r!}{n_1!\ldots n_k!}$$

إنها المبرهنة التي تعمم علاقة ثنائي الحد إلى مضاعف الحد (Multinome)، لا يتغير شيء في المحاكمة الخاصة بتبديلات المتغيرات τ وعددها m_i من أجل كل مخطط من مخططات المجموعة ولذا فإن المعامل المقابل لـ $\frac{[\mathscr{C}(\beta)]^r}{r!}$، أي المقابل لـ $\sum n_i m_i = n$ هو

$$\frac{212\ 1}{n_1!\ldots n_k!(m_1!)^{n_1}\ldots(m_k!)^{n_k}}$$

7,3- قواعد حساب المخططات

لنلخص ما سبق بالقول إننا نحصل على إسهام المخططات في النشر من الرتبة n لدالة التجربة X على النحو التالي:

نرسم n مربعاً، مع خطين داخلين وخطين خارجين، يقابل كل واحد منها مقلوب درجة حرارة τ، ويقابل كل خط جسيماً يحدد الدليل s حالته. نصل هذه الخطوط فيما بينها بكل التوفيقات الممكنة على شرط أن نحصل على مخططات مترابطة وألا تتغير اتجاهات الأسهم على هذه الخطوط. ونقرن المقادير التالية:

1- $\Gamma^0_{jk;mn}$ بكل مربع (رأس متناظر) لـ m و n جسيماً داخلاً، j و k جسيماً خارجاً

2- $g_s(\tau_i - \tau_j)$ لكل خط منبعث من τ_j و τ_i : ناشر فاينمان

3- $(-1)^n$ من الرتبة n للنشر الاضطرابي لـ ρ'

4- $(-1)^D$ حيث D عدد العرى الفيرميونية في المخطط

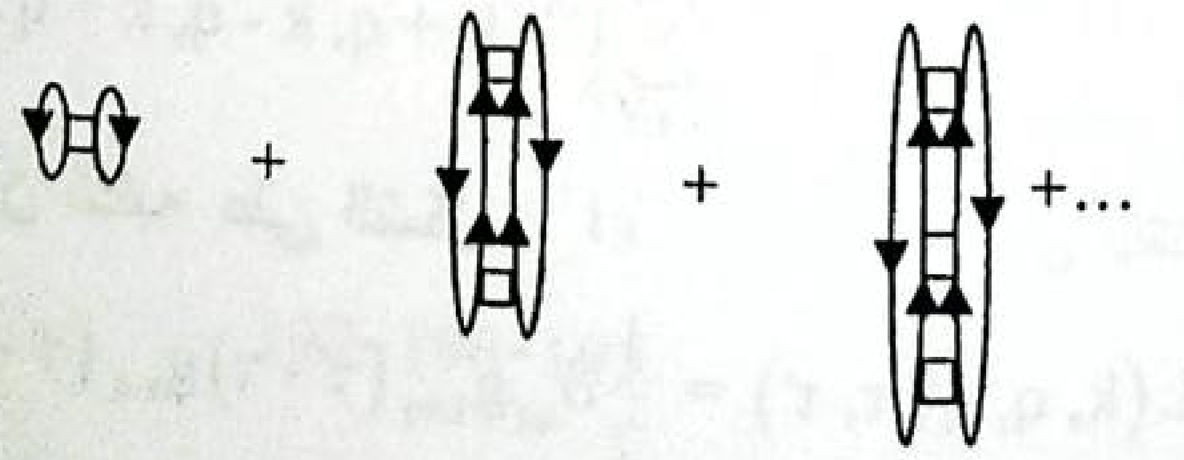
5- $\frac{1}{p}$ حيث p عدد التسوية في المخطط

6- $\frac{1}{2^{n_e}}$ حيث n_e عدد الأزواج المتكافئة فيه

نجمع بعد ذلك على كل الحالات jk;mn كل متجهات الحالة، سبينها، طاقتها، إلخ، ونكامل أخيراً على كل المتغيرات τ في المجال $[0, \beta]$.

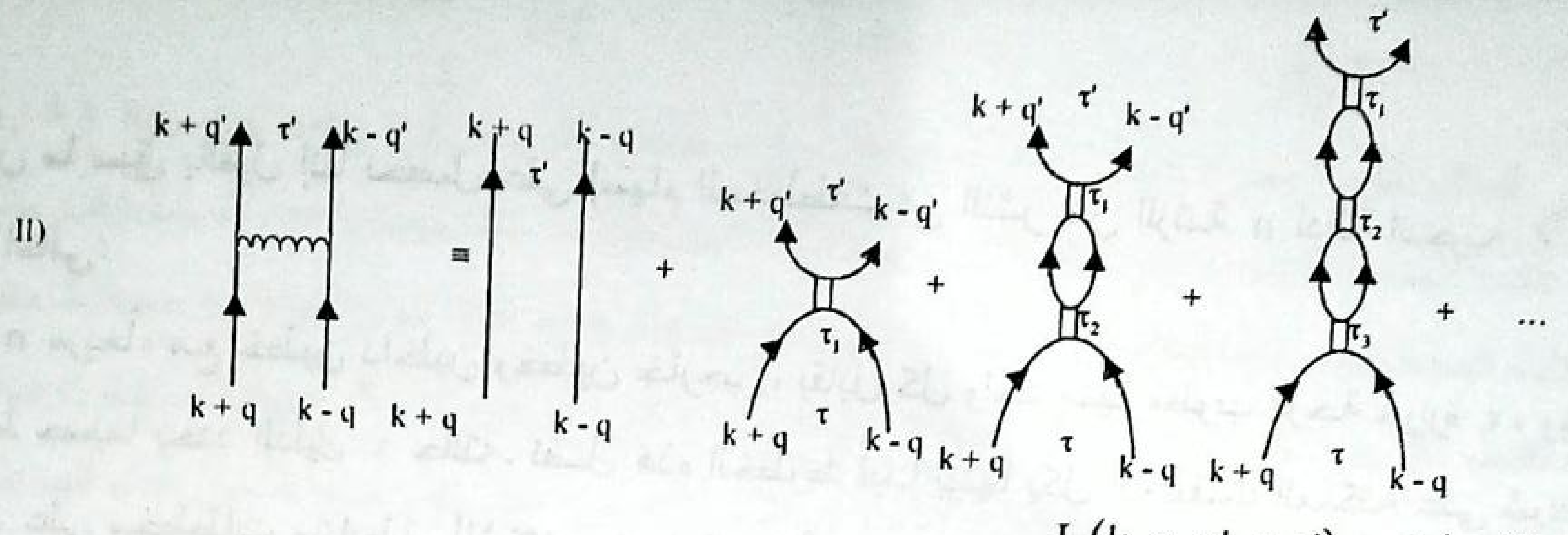
لنأخذ، على سبيل المثال، تبعثر جسيم متفاعل مع جسيم آخر – التصادم زوجاً زوجاً – فنحصل على مجموعة المخططات المترابطة التالية، وهي أبسط هذه المخططات

I)

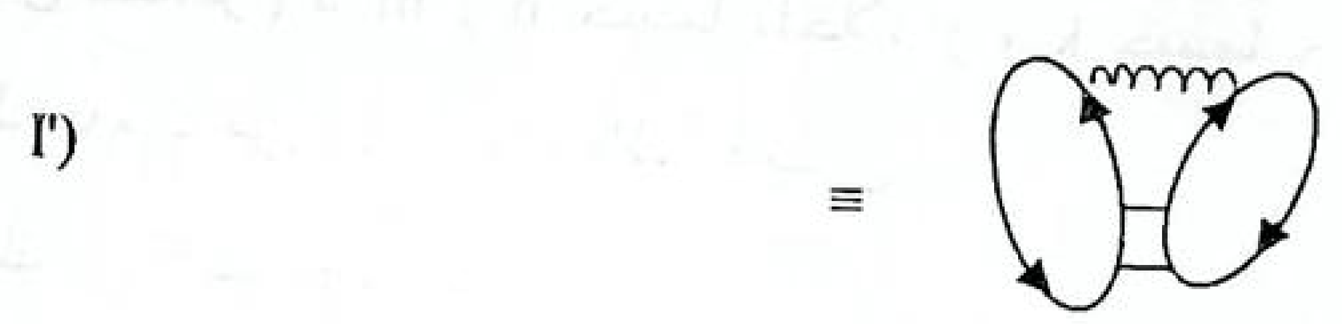


لا يظهر أي جسيم آخر عدا الجسيمين المتبعثرين في هذه المخططات ولا يبدو تأثير الجسيمات الأخرى إلا عبر المعامل الإحصائي $\langle N_s \rangle_0$ الذي تتضمنه نواشر فاينمان للجسيمين المتفاعلين. إن عدد التسوية p في المخطط ذي الرتبة n هو عدد التبديلات الدوارية لـ n عدداً ويساوي n : n = n

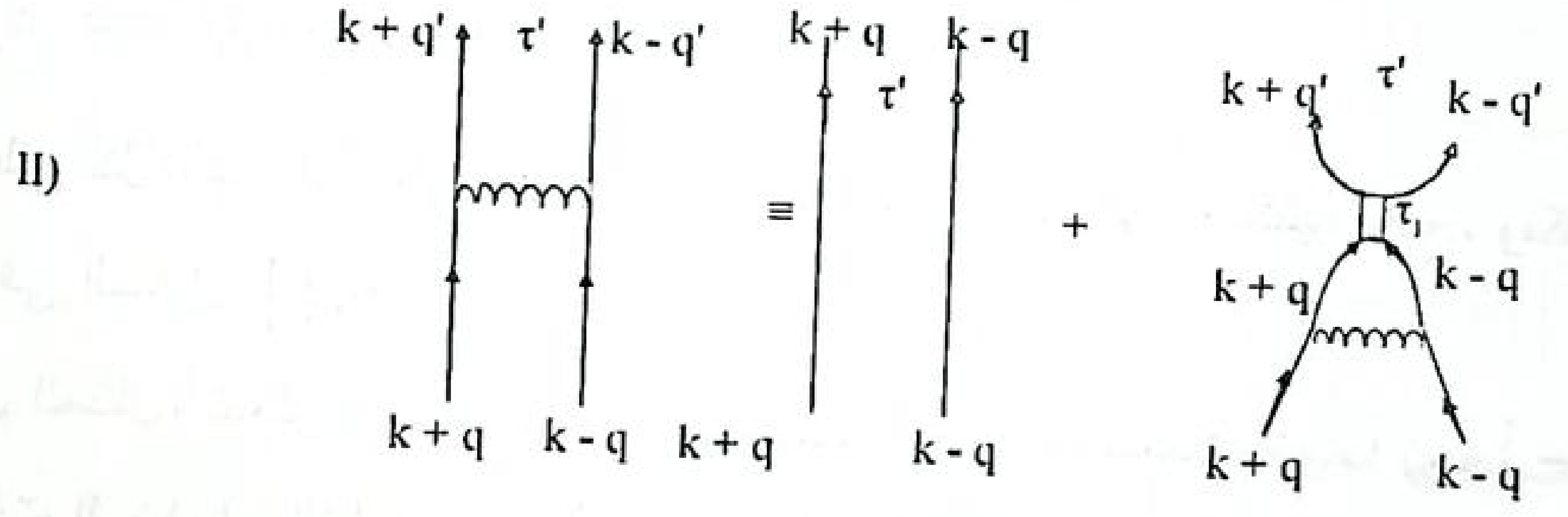
لننظر الآن إلى هذا النشر في التمثيل p مستعينين بالمخطط التالي:



ونرمز لإسهامه بـ $L(k, q, q', \tau, \tau')$



بحيث يمكن أن نكتب إسهام المخطط I = I على شكل جداء لرأس واحد τ مضروباً بالمخطط II



وإسهامه هو إذاً

$$\sum_{k,q,q'} \Gamma^0(k+q, k-q, k+q', k-q')\, L(k, q, q', \tau, \tau')$$

نستعمل الشكل التكراري للمخطط (II' بأن نكتبه على الشكل

$$L(k, q, q', \tau, \tau') = \frac{1}{2}\delta_{qq'} g_{k+q}(\tau'-\tau) g_{k-q}(\tau'-\tau) - \frac{1}{2}\sum_{q_1}\int_0^\beta d\tau_1 \times$$
$$g_{k+q'}(\tau'-\tau_1) g_{k-q'}(\tau'-\tau_1) \Gamma^0(k+q', k-q', k+q_1, k-q_1) \times \tag{3.24}$$
$$L(k, q, q_1, \tau, \tau_1)$$

ليس لهذه المعادلة مثلها مثل كل معادلات الاضطراب حل بصورة عامة. لقد وجد توليس Thouless حلاً لها في الحالة الفيرميونية وفي حالة إمكانية كتابة دالة الرأس المتناظرة Γ^0 على شكل جداء $\Gamma^0(q, q') = \gamma_{q'}\gamma_q$ واستعملها في نظرية فائقية التوصيل.

ثبت المصطلحات

إثارة أولية (شبه جسيم)	158-104	Elementary excitation (Pseudo particle)
أثر (المصفوفة)	201-173-5	Trace
إحداثيات		
- عامة	34	
- نظامية	170-45-30	Normal
إحصاء		
- بوز-آنشتاين، فيرمي ديراك	54	
استبدال		
تفاعل الـ -	128	
مؤثر الـ -	128-89-53	
أنتروبية	74-65-17-10-2	
اهتزازات		
- صوتية، ضوئية	103	
- خاصة	37	
بئر (الكمون)	116-88-37-4	
بوزون	54	
تانسور	158-118-107-91-52-5	Dispersion
تشتت	100	Condensation
تكثف	189-166-76	
تقريب		
- بورن	147	
- دوباي	40	Pairinig
- شبه التقليدي	11	Frequency
تقلص (قرن)	197-196-195	
تواتر		
- وسطي	38	Equilibrim
- ات النظمة الخاصة	34	
توازن إحصائي	12-10-8	
- ترموديناميكي	55-11-1	
- ميكانيكي	156-33	

تناظر	97	
فائقية الـ –	55	
توزع	-124-68-67-62-33-30	Distribution
– بولتزمان	165-161	
– بوز–آنشتاين	80-64-54	
– فيرمي–ديراك	80-64-61-55	
– قانوني	14	
– قانوني–كبير	56	
– ميكروقانوني	14	
– ماكسويل	12	
– بالتساوي	58-40-26	Equipartition
ثابتة أولر	152	
– بلانك	80	
– الغاز الكيميائية	32	
ثقوب	122	Holes
جداء		Convolution
– التلاف	182	
حالة		State
– متاحة (مواتية)	19-1	Accessible -
– مزيج	8-5	Mixed -
– نقية	8-3	pure -
متجهة الـ (انظر دالة الموجة)	110-9-3	
خطوة (الشبكة)	63	
خواء	27	
حالة الـ –	122	
طاقة –	39	
القيمة الوسطية في –	200-196	
حرارة لاطية	141	
دالة		Partition function
– بريللوان	130-24	
– بلوخ	118-110	
– التجزئة	59-57-25-19-16	
– التوزع الإحصائي	7-2-1	

– توزع التواتر	106-40	
– دوباي	41	
– ديراك	14	
– ديريكلي	47	
– الرأس	206	Vertex
– ريمان	47-46	
الـ – غاما	45	
– غرين (توزيعة غرين)	186-183-180-179-173	
– – المؤخرة	191	Retarted
– – المسبقة	191	Advenced
الـ – متعددة المقابلة	101	Multivalued
– محدبة	176-60	Convex
– ميرمورفية	47-45	
– هولومورفية	45	
درجة حرارة		
– – دوباي	106-40	
– – كوري	131	
– الحرارة الحرجة	152-143-139-138	
دور (القاعدة)	98	Period
ذرات معطية	123	Donor
– متقبلة	123	Acceptor
زمرة		Groupe
– تبديلات		Permutation
– فضائية	55	Spatial
– نقطية	97	
روتون	97	Roton
شبكة (بلورية)	165-160	
– برافيه	97	
الـ – المعكوسة	98	Reciprocal
الشبيكة (الخلية البدائية)	99	Lattice
طاقة الترابط	98	
– فيرمي	96-94	
– ممنوعة	147-121	
– هيلمهولتز الحرة	121-120-116-110	
	-136-80-79-58-31-17	
	142	

- القطاع الممنوع 124
عازل 120
عروة 208-207-205 Loop
عقدة (الشبكة) 98
غاز بوز 151
- فيرمي (الإلكتروني) -146-85-75-74-71-69
188
- كامل كمومي 67-62-26
- بوزوني 158-78-77-75
- فيرميوني 186
فضاء Space
- الطور 14-1 Phase -
- الهيئة 3 Configuration -
فوتون 104-80
فونون -159-158-123-105-104
165
51
فيرميون 131-25
قابلية مغنطيسية
قانون
- الانزياح (فين) 83
- بولتزمان 84
- تشتت الموجات 114-100
- دولونغ-بوتي 42-39
- فيس-كوري 131
- كوري 25
قطاع Band
- بريللوان 108-102
- التوصيل 121
- التكافؤ 121
- الطاقة 110
طاقة الـ - الممنوع 124
قيمة رئيسية 185 Principal value
كتلة فعالة 155-124-119
- الثقب الفعالة 124
كرة فيرمي 133-120-89-73-70
سطح - - (مستوى فيرمي) 120-89

الكمون الترموديناميكي	32	
– الكبير	74-62-57	
– الكيميائي	185-124-63-58 -33	
مبرهنة التجمعات المرتبطة	209	Linked cluster theorem
– ليوفيل	7-1	
– فيك	200-194	
– نيرنست	12	
مبدأ		
– الاستبعاد	146-127-54	Exclusion
– اللاتحديد	52-3	Uncertainty
– عدم التمييز	52	
محم (مستودع حراري)	14	Thermostat
معادلة أولر	91	
– بلوخ	171-167	
– الحالة	66	
– الغاز الكامل الكمومية	67	
– الغاز الإلكتروني المتدني	75-74-69	
– – البوزوني	78-76-75	
– الإشعاع الأسود	80-79	
مستديم	56	Permanent
معامل التمدد الحراري	42	
– لاندي	22	
معين (سلاتر)	101-88-56	Déterminant
مغناتون (بور)	140-128	
مفعول كوير	150-148-146	
– مايسنر	143-140	
مقام	36	Mode
مناطق (فيس)	132	Domains
منظر	53	Symmetrizer
– مضاد	53	
موصل		
نصف – نقي	122	
– – من النوع N	122	
– – – P	123	
مؤثر، إحداث، فناء	178-146-122-105	Creation, Annihilation

- الاستبدال 89-55-52
- التطور 171-167-7
- عدد الجسيمات (انشغال الحالة) 150-147-56
- الطاقة الحركية 89
- (مصفوفة) الكثافة 180-58-17-14-7-5-4
- موجب 60
ناشر فاينمان (دالة غرين) 211-199-196 Propagator
نصف معدن 123
- قطر بور 90
نظرية التوزيعات 72
نقطة تجوف (سرج) 108-107 Saddle point
- تشعب 104 Ramification
- التكثف 78-77
وسيط الانتظام (الترتيب) 166-143 Order parameter

أسماء العلم

الأسماء	الصفحات	
الكرجي	46	
بدنورز–مللر	139	Bednorz-Müller
برنوللي	46	Bernoulli
بلوخ	171–167–118–110	Bloch
بور	128–90–22–11	Bohr
بولتزمان	–80–67–62–33–30–12–2 169–124–82	Boltzmann
بورن	147	Born
بوز	158–151–78–76–64–61–54	Bose
بويل–ماريوط	26	Boyl-Mariotte
برافيه	98	Bravais
بريللوان	130–118–102–24	Brillouin
كوشي	185	Cauchy
كوشي – شفارتز	175	Cauchy-Schwarz
كوبر–باردن–شريفر	146	Cooper-Bardeen-Schrieffer (CBS)
كوري	131–25	Curie
دوباي	106–41–38	Debye
ديراك	178–80–68–64–55–14	Dirac
ديريكلي	47	Dirichlet
دولونغ–بوتي	42–39	Delong-Petit
أنشتاين	78–76–64–61–54	Einstein
أولر	152–91	Euler
فيرمي	80–68–64–55	Fermi
فاينمان	196–194–183–166–160	Feynman
جيبس	14	Gibbs
غرين	–186–183–180–179–177	Green

هايزنبرغ	189-187	Heisenberg
هيلمهولتز	113-7-3	Helmholtz
هيفسايد	17	Heaviside
كابيتزا	187	Kapitza
كتيل	155	Kittel
لانداو	120	Landau
- ليفشيتس	160-159-155-78	
لاندي	79	Landé
لوجاندر	22	Legendre
ليفيشيتس-بيتافيسكي	58	Lifchitz-Pitaevski
ليوفيل	151	Liouville
لندن	86-7-1	London
ماتسوبارا	157-143	Matsubara
ماكسويل	199	Maxwell
مايسنر	79-63-12-2	Meissner
نيرنست	143-140	Nernst
أونس	12	Onnes
باولي	138	Pauli
بلانك	54	Planck
بواسون	85-83-82-81-80	Poisson
ريلي-جينز	66	Reighly-Jeans
ريمان	82-81	Riemann
ريدبيرغ	47-46	Riedberg
شرودينغر	90	Schrödinger
	-177-167-118-109-7-3	
سلاتر	186	Slater
سترلينغ	88-56	Sterling
سومرفلد	20	Sommerfeld
ستيفان-بولتزمان	11	Stefan-Boltzmann
	84-79	

توليس	212	Thouless
فيس	133-132	Weiss
فيك	200-194	Wick
فين	85-83-82-81-79-2	Wien
فينر	21	Wiener
فيغنر	96	Wigner

Thouless	212	توليس
Weiss	133-132	فيس
Wick	200-194	فيك
Wien	85-83-82-81-79-2	فين
Wiener	21	فينر
Wigner	96	فيغنر

طوب بريس

العنوان، رقم 22، زنقة كلكوتة، المحيط، الرباط
الهاتف، 21 31 73 37 05 (212+) - الفاكس، 28 39 26 37 05 (212+)
الموقع الإلكتروني، www.toppress.ma
البريد الإلكتروني، toppress2@gmail.com

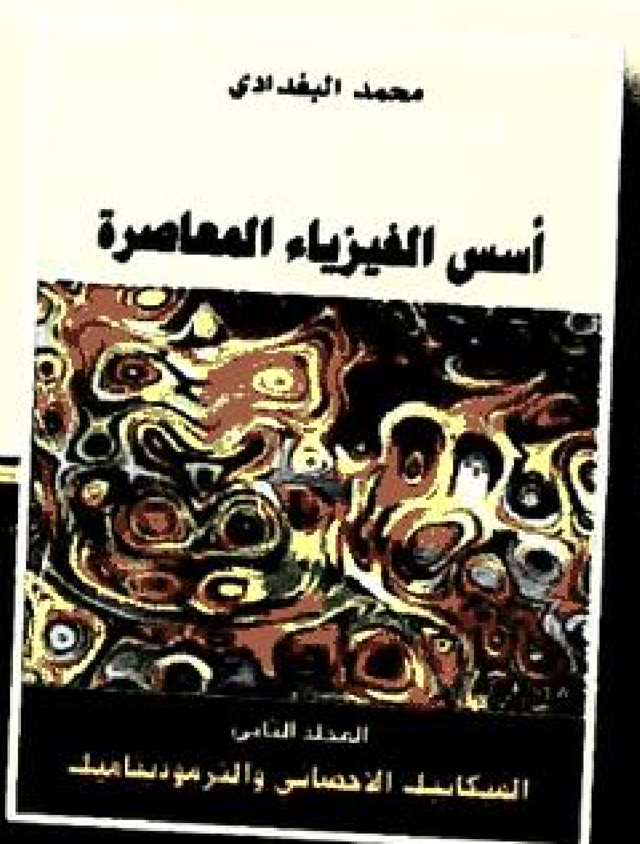
أ. د. محمد البغدادي

- أستاذ الفيزياء النظرية
- مؤسس ومدير مختبر الفيزياء النظرية في جامعة محمد الخامس بالرباط (1972-1998)
- عضو أكاديمية العلوم للعالم الثالث - TWAS - 1987.
- درس الرياضيات والفيزياء في جامعات مختلفة، وباللغة العربية على وجه الخصوص في جامعة دمشق والمدرسة العليا للأساتذة بالرباط.
- ألف كتب دراسات عليا بالفرنسية: النظريات الكمومية النسبوية، الرياضيات - الفيزياء (بجزئين) بدعم من وزارة التعليم العالي وتكوين الأطر والبحث العلمي بالمغرب.
- ترجم إلى العربية:

* كتاب كارل بوبر: «منطق البحث العلمي»، عن الألمانية.

* كتاب رشدي راشد: «الهندسة وعلم المناظر في ضحى الإسلام»، عن الإنجليزية.

* كتاب رشدي راشد «من الخوارزمي إلى ديكارت»، عن الفرنسية، قيد الإنجاز.



الثمن: 250 درهم